



**ОПОВІДІ**  
НАЦІОНАЛЬНОЇ  
АКАДЕМІЇ НАУК  
УКРАЇНИ

6 • 2014

---

Науково-теоретичний журнал Президії Національної академії наук України

Заснований у 1939 р.

Виходить щомісяця

---

**РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ ЖУРНАЛУ**

А. Г. НАУМОВЕЦЬ (головний редактор), П. І. Андон, С. А. Андронаті, Л. А. Булавін, А. Ф. Булат, Г. М. Гавричкова (заст. головного редактора), В. М. Геєць (заст. головного редактора з наук. питань), В. В. Гончарук, В. Т. Грінченко, Я. М. Григоренко, Д. М. Гродзинський, В. М. Єремєєв, В. О. Іванов, І. М. Коваленко, С. В. Комісаренко, В. П. Кухар, В. М. Локтев, О. О. Мойбенко, В. В. Моргун, І. М. Неклюдов, В. Д. Походенко, І. К. Походня, А. М. Самойленко, В. П. Семиноженко, І. В. Сергієнко, В. І. Старостенко, Б. С. Стогній, В. М. Шестопапов, Я. С. Яцків

© Національна академія наук України, 2014

Редактори розділів

**Л. М. Литвинова, Л. І. Пузанкова, Т. І. Хоменко**

Оформлення художника В. Г. Самсонова

Комп'ютерна верстка В. І. Бойко, Г. В. Попович

Видавничий дім «Академперіодика»

Свідоцтво про внесення до Держреєстру суб'єкта видавничої справи  
серії ДК № 544 від 27.07.2001

01004, Київ, вул. Терещенківська, 4

---

Підписано до друку 05.06.2014. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 18,06. Обл.-вид. арк. 16.  
Тираж 213 прим. Зам. 3926. Ціна 30 грн.

---

Друкарня Видавничого дому «Академперіодика». 01004, Київ, вул. Терещенківська, 4

## Зміст

---

### Математика

- Антонюк А. В., Кочубей А. Н., Пискарев С. И.* О компактности и равномерной непрерывности разрешающего семейства для уравнения с дробными производными .... 7
- Волчков В. В., Волчков Вит. В.* Переопределенные интерполяционные задачи для целых функций экспоненциального типа ..... 13
- Дегтярев С. П.* Мультипликаторы Фурье в пространствах с частичным свойством Гельдера и их применение к оценкам Шаудера ..... 17
- Лось В. Н., Мурач А. А.* Параболические смешанные задачи в пространствах обобщенной гладкости ..... 23
- Шаповал Н. М.* Группа точковых симетрий системы вільних рівнянь другого порядку ..... 32

### Інформатика та кібернетика

- Бондаренко Є. В.* Ріст графів дії скінченних автоматів ..... 37
- Лебедева Т. Т., Семенова Н. В., Сергиенко Т. И.* Возмущенные упорядочивающие конусы для анализа задач векторной оптимизации в условиях неопределенности ..... 42
- Редько В. Н., Буй Д. Б., Сенченко А. С.* Некоторые равенства в табличных алгебрах .... 48
- Стецюк П. И., Романова Т. Е., Шайтхауэр Г.* О глобальном минимуме целевой функции в задаче равновесной упаковки кругов ..... 53

### Механіка

- Камінський А. О., Селіванов М. Ф.* Злиття двох колінеарних тріщин різної довжини у в'язкопружній композитній пластині ..... 58
- Хорошун Л. П.* Построение модели деформирования и кратковременной повреждаемости слоистого композита на основе деформационного критерия микропрочности .. 65

### Фізика

- Слюсаренко Ю. В., Бойченко Н. П.* Бозе-ейнштейнівський конденсат фотонів і зупинка світла в ультрахолодних газах бозе-атомів ..... 74

### Теплофізика

- Панин В. В., Кривошей Ф. А., Богдан Ю. А.* Стохастическая регуляризация некорректных задач теплопереноса ..... 80

### Науки про Землю

- Звольський С. Т.* Визначення вологості ґрунтів різної щільності радіоізотопними методами ..... 85
- Лукин А. Е., Самойленко И. И.* О дисперсных самородно-металлических частицах в черносланцевых формациях эвксинского типа — мегаловушках природного газа ..... 92
- Полонский А. Б., Кибальчич И. А.* Межгодовая изменчивость циркуляции атмосферы и аномалии температуры Восточной Европы в зимний период ..... 100
- Присяжнюк В. А.* Новые данные об отложениях с “карпатской галькой” Верхнего Побужья (Летичевщина) ..... 108

## Хімія

- Калініченко К. В., Ніковська Г. М., Ульберг З. Р.* Поверхневі властивості та стійкість мулових колоїдних систем в процесах екстракції важких металів ..... 114
- Тітов Ю. О., Білявіна Н. М., Марків В. Я., Слободяник М. С., Полубінський В. В.* Синтез та кристалічна структура двошарових індоитанатів  $Sr_2LnInTiO_7$  ..... 120
- Штомпель В. І., Рябов С. В., Поліщук Т. А., Керча Ю. Ю.* Про роль хімічної будови аніонного поліелектроліту в формуванні структури поліелектролітних комплексів на основі гідрохлориду полі-4-вінілпіридину ..... 126

## Біологія

- Берестяная А. Н.* Аналіз методів оцінки метилювання остатків цитозина на прикладі ДНК монокарпического рослини *Linum usitatissimum* ..... 133
- Межжерин С. В., Циба А. А., Межжерина Д. С., Пухтаевич П. П.* Ситуація наростаючого преса генетических аномалий в диплоидно-полиплоидной популяції щиповок (Cypriniformes, Cobitidae, *Cobitis*) ..... 140

## Біохімія

- Прилуцька С. В.* Дія комплексу  $C_{60}$  фулерену і доксорубіцину на пухлинні клітини *in vitro* та *in vivo* ..... 146
- Семеніхін А. В., Золотарьова О. К.* Ідентифікація карбоангідразної активності, асоційованої з білковими комплексами фотосинтетичних мембран хлоропластів шпинату ..... 151

## Біофізика

- Микуляк В. В., Корнелюк О. І.* Структура і динаміка тирозил-тРНК синтетази *Mycobacterium tuberculosis* у комплексі з інгібітором SB-219383 ..... 156

## Медицина

- Григоренко Я. М., Григоренко А. Я., Тормахов Н. Н., Шпак Д. Ю., Флис П. С.* Методика лікування гнатической форми мезіального прикуса ..... 160
- Федорчук О. Г., Льон Г. Д., Якшибаева Ю. Р., Горбик Г. В., Пяковська О. М.* Чутливість клітин карциноми легені Льюїса LLC та LLC/R9 до цитотоксичної дії природних кілерних клітин та макрофагів мишей C57BL/6 *in vitro* ..... 167

# Contents

---

## Mathematics

- Antoniouk A. V., Kochubei A. N., Piskarev S. I.* On the compactness and the uniform continuity of a resolvent family for a fractional differential equation ..... 7
- Volchkov V. V., Volchkov Vit. V.* Overdetermined interpolation problems for entire functions of the exponential type ..... 13
- Degtyarev S. P.* Fourier multipliers in the spaces with partial Hölder property and their application to the Schauder estimates ..... 17
- Los V. N., Murach A. A.* Parabolic mixed problems in spaces of generalized smoothness ..... 23
- Shapoval N. M.* The point symmetry group of a system of free second-order equations ..... 32

## Information Science and Cybernetics

- Bondarenko I. V.* Growth of action graphs of finite automata ..... 37
- Lebedeva T. T., Semenova N. V., Sergienko T. I.* Perturbed ordering cones for the analysis of vector optimization problems under uncertainty ..... 42
- Red'ko V. N., Buy D. B., Senchenko A. S.* Some equalities in table algebras ..... 48
- Stetsyuk P. I., Romanova T. E., Schiethauer G.* On the global minimum of the objective function in a balanced circular packing problem ..... 53

## Mechanics

- Kaminsky A. A., Selivanov M. F.* Coalescence of two unequal collinear cracks in a viscoelastic composite plate ..... 58
- Khoroshun L. P.* Construction of a model of deformation and short-time damageability for a laminate composite on the basis of the deformation criterion of microstrength ..... 65

## Physics

- Slyusarenko Yu. V., Boichenko N. P.* The photonic Bose-Einstein condensate and stopped light in ultracold atomic gases ..... 74

## Heat physics

- Panin V. V., Krivoshey F. A., Bogdan Yu. A.* Stochastic regularization of ill-posed problems of heat transfer ..... 80

## Geosciences

- Zvolsky S. T.* Determination of the moisture content of soils with different densities by radioisotope methods ..... 85
- Lukin A. E., Samoilenko I. I.* On dispersed native metal particles in black shales of the euxinic type — megatrap of natural gas ..... 92
- Polonsky A. B., Kibalchich I. A.* Interannual variability of the atmospheric circulation and temperature anomalies in the Eastern Europe in winter ..... 100
- Prysiashniuk V. A.* New data on the deposits with “Carpathian pebbles” of the Upper Pobuzhye (the Letichev region) ..... 108

## Chemistry

- Kalinichenko K. V., Nikovskaya G. N., Ulberg Z. R.* Surface properties and stability of colloidal sludge systems in the processes of extraction of heavy metals ..... 114
- Titov Yu. A., Belyavina N. M., Markiv V. Ya., Slobodyanik M. S., Polubinskii V. V.* Synthesis and crystal structure of two-layer indotitanates  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ..... 120
- Shtompel V. I., Riabov S. V., Polischuk T. A., Kercha Yu. Yu.* The role of the chemical structure of an anionic polyelectrolyte in the formation of a structure of polyelectrolyte complexes based on poly-(4-vinylpyridine) hydrochloride ..... 126

## Biology

- Berestyanaya A. N.* The analysis of methods for assessing the methylation of cytosine residues in the DNA sample of monocarpic plant *Linum usitatissimum* ..... 133
- Mezhzherin S. V., Tsyba A. A., Mezhzherina D. S., Pukhtaevitch P. P.* Situation of the increasing pressure of genetic abnormalities in a diploid-polyploid population of spines loaches (Cypriniformes, Cobitidae, *Cobitis*) ..... 140

## Biochemistry

- Prylutska S. V.* Effect of the complex of  $\text{C}_{60}$  fullerene with doxorubicin on tumor cells *in vitro* and *in vivo* ..... 146
- Semenihin A. V., Zolotareva E. K.* Identification of carbonic anhydrase activity associated with protein complexes of photosynthetic membranes of spinach chloroplasts ..... 151

## Biophysics

- Mykuliak V. V., Kornelyuk A. I.* Structure and dynamics of *Mycobacterium tuberculosis* tyrosyl-tRNA synthetase in complex with SB-219383 inhibitor ..... 156

## Medicine

- Grigorenko Ya. M., Grigorenko A. Ya., Tormakhov N. N., Shpak D. Yu., Flis P. S.* A treatment method for the gnathic form of the mesial occlusion ..... 160
- Fedorchuk O. G., Lyon A. D., Yakshibaeva Yu. R., Gorbik G. V., Pyaskovskaya O. N.* Sensitivity of Lewis lung carcinoma (LLC) and LLC/R9 cells to cytotoxic action exerted by murine killer cells and macrophages of C57BL/6 mice *in vitro* ..... 167



УДК 517.9;517.28;517.3

А. В. Антонюк, А. Н. Кочубей, С. И. Пискарев

### О компактности и равномерной непрерывности разрешающего семейства для уравнения с дробными производными

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины М. Л. Горбачуком)

*Исследованы компактность и равномерная непрерывность разрешающего семейства операторов уравнений с дробными производными в банаховом пространстве.*

Известен классический результат [1] о том, что для  $C_0$ -полугруппы  $\exp(tA)$ , непрерывной при  $t > 0$  по норме операторов, ее компактность для всех  $t > 0$  эквивалентна компактности резольвенты  $(\lambda I - A)^{-1}$  для некоторого  $\lambda \in \rho(A)$ . Следует также заметить [2], что компактность генератора  $A$  эквивалентна компактности семейства  $\exp(tA) - I$  для любого  $t \geq 0$ . Свойство непрерывности полугруппы операторов при  $t > 0$  в равномерной операторной топологии и само по себе принадлежит к числу важнейших [1, 3]. С другой стороны, компактность разрешающего семейства для дифференциальных уравнений в банаховом пространстве интенсивно используется при изучении различных аспектов анализа существования решений [4] и их аппроксимации [5] для дифференциальных уравнений вида  $u'(t) = Au(t) + f(u(t))$ . С этой точки зрения представляет интерес исследование аналогичных свойств для уравнений с производными дробного порядка, что и составляет цель данной работы.

Отметим, что эволюционные уравнения порядка  $\alpha \in (0, 1)$  используются в физике для моделирования аномальной диффузии, при которой среднеквадратичное отклонение диффундирующей частицы за время  $t$  ведет себя как  $\text{const} \cdot t^\alpha$  при  $t \rightarrow \infty$ . Детальное исследование свойств соответствующих эволюционных семейств может быть полезным для разработки приближенных и численных методов для таких уравнений.

Для  $0 < \alpha < 1$  скажем, что задача Коши в банаховом пространстве  $E$

$$(\mathbb{D}_t^{(\alpha)} u)(t) = Au(t), \quad u(0) = x \tag{1}$$

является корректно поставленной, если уравнение Вольтерра

$$u(t) = x + \int_0^t g_\alpha(t-s)Au(s) ds \quad (2)$$

корректно разрешимо в смысле [6]. Соответствующее разрешающее семейство операторов  $x \mapsto u(t)$  для  $t > 0$  обозначим  $T_\alpha(t, A)$ . Выше  $\mathbb{D}_t^{(\alpha)}$  обозначает производную Капуто–Джрбашяна [7]:

$$(\mathbb{D}_t^{(\alpha)} f)(t) = \frac{d}{dt}(I_{0+}^{1-\alpha} f)(t) - \frac{f(0)}{\Gamma(1-\alpha)} t^{-\alpha},$$

где  $(I_{0+}^\alpha f)(t) := (g_\alpha * f)(t)$  — дробный интеграл,  $g_\alpha(t) := t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$ . Предполагается, что разрешающее семейство операторов  $T_\alpha(t, A)$  задачи (2) для некоторых  $M, \omega > 0$  удовлетворяет неравенству

$$\|T_\alpha(t, A)\| \leq M e^{\omega t}, \quad t > 0. \quad (3)$$

При этом  $\{\lambda^\alpha : \operatorname{Re} e\lambda > \omega\} \subset \rho(A)$  и для  $\operatorname{Re} e\lambda > \omega, x \in E$  имеем

$$R_\alpha(\lambda, A) := \lambda^{\alpha-1}(\lambda^\alpha I - A)^{-1} x = \int_0^\infty e^{-\lambda t} T_\alpha(t, A) x dt. \quad (4)$$

Аксиоматические характеристики разрешающего семейства, позволяющие восстановить оператор  $A$ , найдены в [8, 9].

Заметим, что для ограниченного оператора  $A$  семейство  $T_\alpha(t, A)$  может быть задано с помощью функции Миттаг-Леффлера:

$$T_\alpha(t, A) = \sum_{j=0}^\infty \frac{(t^\alpha A)^j}{\Gamma(\alpha j + 1)}. \quad (5)$$

Достаточные условия разрешимости задачи (1) с неограниченным оператором  $A$  и теорема единственности решения доказаны в [10, 11].

**1. Свойства  $T_\alpha(t, A)$ , когда  $A$  порождает  $C_0$ -полугруппу.** Если оператор  $A$  порождает  $C_0$ -полугруппу  $\exp(tA)$ , то для нее выполнена оценка вида (3) с некоторыми константами  $M_1$  и  $\omega$ . Тогда для разрешающего семейства  $T_\alpha(t, A)$  оценка (3) выполнена с константами  $M_\alpha$  и  $\omega_\alpha = 1/\alpha$ . Более того, для любых  $\alpha, \beta: 0 < \alpha < \beta < 1$  имеет место тождество субординации [12]:

$$T_\alpha(t, A) = \int_0^\infty \varphi_{t, \alpha/\beta}(s) T_\beta(s, A) ds, \quad t > 0, \quad (6)$$

с  $\varphi_{t, \gamma}(s) = t^{-\gamma} \Phi_\gamma(st^{-\gamma})$ , где  $\Phi_\gamma(\zeta) = \sum_{k=0}^\infty (-\zeta)^k / (k! \Gamma(-\gamma k + 1 - \gamma))$  — функция Райта.

Заметим, что  $\Phi_\gamma(t) \geq 0, t > 0$  и  $\int_0^\infty \Phi_\gamma(t) dt = 1$ .



**Утверждение 1.** Если разрешающее семейство  $T_\beta(t)$  для некоторого  $0 < \beta \leq 1$  является равномерно непрерывным при  $t > 0$ , то оператор-функция  $T_\alpha(t)$  для любого  $0 < \alpha < \beta$  обладает тем же свойством.

**Доказательство.** Из асимптотических свойств функции Райта следует

$$0 \leq \varphi_{t,\alpha/\beta}(s) \leq Ct^{-\alpha/\beta} e^{-cs \frac{\beta}{\beta-\alpha} t^{-\frac{\alpha}{\beta-\alpha}}}, \quad s > 0. \quad (7)$$

Для  $t_0 > 0$  из некоторого интервала  $\Delta = (t_0/2, 2t_0)$  из (7) имеем

$$0 \leq \varphi_{t,\alpha/\beta}(s) \leq 2^{\alpha/\beta} Ct_0^{-\alpha/\beta} e^{-2^{-\frac{\alpha}{\beta-\alpha}} cs \frac{\beta}{\beta-\alpha} t_0^{-\frac{\alpha}{\beta-\alpha}}}, \quad s > 0,$$

т. е.

$$0 \leq \varphi_{t,\alpha/\beta}(s) \leq C_1 e^{-c_1 s \frac{\beta}{\beta-\alpha}}, \quad s > 0. \quad (8)$$

Из предположений следует, что  $T_\alpha(t)$  является сильно измеримой со значениями в банаховом пространстве  $B(E)$  [13, следствие 1.1.2]. Используя  $B(E)$ -значную версию теоремы о мажорируемой сходимости [13, теорема 1.1.8], из (3) и (8) получаем требуемое свойство непрерывности. Заметим, что  $\beta/(\beta - \alpha) > 1$ .

**2. Свойства компактности разрешающего семейства.** Пусть  $B_0(E)$  — пространство компактных операторов в пространстве  $E$ .

**Утверждение 2.** 1. Если для некоторого  $\alpha \in (0, 1)$   $T_\alpha(t, A) \in B_0(E)$  для  $t > 0$ , то  $T_\beta(t, A) \in B_0(E)$  для любого  $\beta \in (0, \alpha)$ .

2. Если для некоторого  $\alpha \in (0, 1)$   $T_\alpha(t, A) - I \in B_0(E)$  для  $t > 0$ , то  $T_\beta(t, A) - I \in B_0(E)$  для любого  $\beta \in (0, \alpha)$ .

**Доказательство** следует из свойства субординации (6), оценки (8) и теоремы 1.3 в [14].

**Теорема 1.** Для разрешающего семейства  $T_\alpha(t)$ , удовлетворяющего оценке (3), следующие условия эквивалентны:

- (i)  $T_\alpha(t) - I \in B_0(E)$ ;
- (ii)  $\lambda R_\alpha(\lambda) - I \in B_0(E)$  для  $\{\lambda^\alpha: \operatorname{Re} \lambda > \omega\} \subset \rho(A)$ ;
- (iii)  $A \in B_0(E)$ .

**Доказательство.** (i)  $\Rightarrow$  (ii) следует из теоремы 1.3 в [14] и представления

$$(\lambda R_\alpha(\lambda) - I)x = \lambda \int_0^\infty e^{-\lambda t} (T_\alpha(t) - I) x dt, \quad x \in E.$$

(ii)  $\Rightarrow$  (i). Из аксиоматического описания  $T_\alpha$ , доказанного в [8], выводится, что  $\int_0^t g_\alpha(t - \tau) T_\alpha(\tau) x d\tau \in \mathcal{D}(A)$  для всех  $x \in E$ , что дает возможность вынести оператор  $A$  из-под знака интеграла в (2). Тожество

$$R_\alpha(\lambda)(T_\alpha(t, A) - I) = (R_\alpha(\lambda) - \lambda^{\alpha-1})(T_\alpha(t, A) - I) + \lambda^{\alpha-1}(T_\alpha(t, A) - I)$$

приводит к представлению

$$T_\alpha(t, A) - I = -(\lambda R_\alpha(\lambda) - I)(T_\alpha(t, A) - I) + (\lambda R_\alpha(\lambda) - I) \int_0^t g_\alpha(t - \tau) T_\alpha(\tau, A) f d\tau,$$

из которого следует требуемая компактность оператора  $T_\alpha(t) - I$ .

(ii)  $\Rightarrow$  (iii). Из компактности оператора  $\lambda^\alpha(\lambda^\alpha I - A)^{-1} - I$  следует, что оператор  $(\lambda^\alpha I - A)^{-1}$  является фредгольмовым с нулевым индексом и замкнутой областью значений (как сумма компактного и обратимого оператора  $I$ ). Следовательно, оператор  $A$  является ограниченным. Компактность оператора  $A$  следует из тождества  $\lambda^\alpha(\lambda^\alpha I - A)^{-1} - I = (\lambda^\alpha I - A)^{-1}A$ .

(ii)  $\Rightarrow$  (iii) следует из представления (5).

**Теорема 2.** Для непрерывного по норме в гильбертовом пространстве  $H$  разрешающего семейства  $T_\alpha(t, A)$ , удовлетворяющего оценке (3) в гильбертовом пространстве  $H$ , следующие условия эквивалентны:

(i)  $T_\alpha(t, A) \in B_0(H)$  для  $t > 0$ ;

(ii)  $R_\alpha(\lambda, A) \in B_0(H)$  для  $\lambda$  с  $\operatorname{Re} \lambda > \omega$ .

**Доказательство.** (i)  $\Rightarrow$  (ii) следует из представления (4) и теоремы 1.3 в [14].

(ii)  $\Rightarrow$  (i). Для любого  $x \in H$  и  $\omega_0 := \omega - \mu_0 < 0$  из оценки (3) следует

$$\|T_\alpha(t, A)e^{-t\mu_0}x\| \leq Me^{\omega_0 t}\|x\|, \quad (9)$$

поэтому функция  $\rho(t) = \chi_{[0, \infty)}(t)e^{-\mu_0 t}T_\alpha(t, A)x \in L_2(\mathbb{R}, H)$ , где  $\chi_{[0, \infty)}(t)$  — характеристическая функция. Поскольку для преобразования Фурье  $\mathcal{F}(\rho) = R_\alpha(\mu_0 + i\mu)x$  в гильбертовом пространстве справедлива теорема Планшереля, то, применяя обратное преобразование Фурье, получаем для всех  $t > 0$

$$T_\alpha(t, A)e^{-\mu_0 t}x = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mu t} R_\alpha(\mu_0 + i\mu)x \, d\mu, \quad x \in H. \quad (10)$$

Очевидно, что компактность семейства  $T_\alpha(t, A)$  для фиксированного  $t > 0$  эквивалентна компактности оператора  $G_{\mu_0}(t) := T_\alpha(t, A)e^{-\mu_0 t}$ . Кроме того, представление  $R_\alpha(\lambda)x = \frac{1}{\lambda}R_\alpha(\lambda)Ax + \frac{1}{\lambda}x$  влечет  $R_\alpha(\mu_0 + i\mu)x \rightarrow 0$  при  $|\mu| \rightarrow \infty$  для  $x \in \mathcal{D}(A)$  и  $\mu_0 > \omega$ . Более того, непосредственным подсчетом получаем

$$R'_\alpha(\lambda)x = \frac{\alpha - 1}{\lambda}R_\alpha(\lambda)x - \alpha R_\alpha^2(\lambda)x, \quad (11)$$

$$R''_\alpha(\lambda)x = \frac{(\alpha - 1)(\alpha - 2)}{\lambda^2}R_\alpha(\lambda)x - \frac{3\alpha(\alpha - 1)}{\lambda}R_\alpha^2(\lambda)x + 2\alpha^2 R_\alpha^3(\lambda)x, \quad (12)$$

что, в частности, дает  $\lim_{|\mu| \rightarrow \infty} R'_\alpha(\mu_0 + i\mu)x = 0$ . Также видно, что компактность оператора  $R_\alpha(\lambda)$  эквивалентна компактности  $R''_\alpha(\lambda)$ . Применяя дважды интегрирование по частям к (10), имеем

$$G_{\mu_0}(t)x = \frac{1}{\pi t^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mu t} R''_\alpha(\mu_0 + i\mu)x \, d\mu. \quad (13)$$

Окончательно, компактность оператора  $G_{\mu_0}(t)$  является следствием оценки

$$\begin{aligned} \|G_{\mu_0}(t)x - G_{\mu_0}^N(t)x\| &= \frac{1}{\pi t^2} \sup_{\|x^*\| \leq 1} \left| \left\langle \int_{|\mu| \geq N} e^{i\mu t} R''_\alpha(\mu_0 + i\mu)x \, d\mu, x^* \right\rangle \right| \leq \\ &\leq \frac{2K}{\pi t^2} \sup_{|\mu| \geq N} \|R_\alpha(\mu_0 + i\mu)\| \cdot \|x\|, \end{aligned}$$

которая доказывается с использованием (12), неравенств Гельдера и Коши, свойств преобразования Фурье, а также факта, что равномерная непрерывность семейства  $T_\alpha(t, A)$ , в силу теоремы 2.2 в [15], эквивалентна

$$\lim_{|\mu| \rightarrow \infty} \|R_\alpha(\mu_0 + i\mu)\| = 0, \quad \text{для некоторого } \mu_0 > \omega. \quad (14)$$

Заметим, что операторы  $G_{\mu_0}^N(t)x = 1/(\pi t^2) \int_{-N}^N e^{i\mu t} R_\alpha''(\mu_0 + i\mu)x d\mu$  компактны в силу теоремы 1.3 в [14].

*Замечание.* Также можно дать достаточные условия на компактность семейства операторов  $T_\alpha(t, A)$  при  $t > 0$  непосредственно в терминах оператора  $A$ . Действительно, предположим, что множество  $\Sigma_{\delta, \alpha} = \{\lambda: |\arg \lambda| < \alpha(\pi/2 + \delta); \lambda \neq 0\}$  для некоторого  $\delta \in (0, \pi/2]$  принадлежит резольвентному множеству оператора  $A$ , кроме того, резольвента оператора  $A$  компактна и выполнена оценка

$$\|(\lambda I - A)^{-1}\| \leq C|\lambda|^{-1}, \quad \lambda \in \Sigma_{\delta, \alpha}.$$

Тогда оператор  $T_\alpha(t, A)$  компактен для всех  $t > 0$ . Это следует из представления (4.2) в теореме 4.1 [11], оператора  $T_\alpha(t, A)$  контурным интегралом, сходящимся в равномерной операторной топологии.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке НАН Украины и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 01-01-12/12-01-90 401Укр-а).*

1. Pazy A. Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations – New York: Springer, 1983. – 279 p.
2. Cuthbert J. R. On semigroups such that  $T(t) - I$  is compact for some  $t > 0$  // Z. Wahrsch. und Verw. Geb. – 1971. – **18**, No 1–2. – P. 9–16.
3. Engel K.-J., Nagel R. One-parameter semigroups for linear evolution equations – Berlin: Springer, 2000. – 587 p.
4. Bobylev N. A., Kim J. K., Korovin S. K., Piskarev S. Semidiscrete approximations of semilinear periodic problems in Banach spaces // Nonlinear Anal. – 1998. – **33**, No 5. – P. 473–482.
5. Piskarev S. Convergence of difference schemes for the solution of nonlinear parabolic equations // Mat. Zam. – 1988. – **44**, No 1. – P. 112–123.
6. Prüss J. Evolutionary integral equation and applications. – Basel: Birkhäuser, 1993. – 366 p.
7. Kilbas A. A., Srivastava H. M., Trujillo J. J. Theory and applications of fractional differential equations. – Amsterdam: Elsevier, 2006. – 523 p.
8. Chen Ch., Li M. On fractional resolvent operator functions // Semigroup Forum. – 2010. – **80**. – P. 121–142.
9. Peng J., Li K. A novel characteristic of solution operator for the fractional abstract Cauchy problem // J. Math. Anal. Appl. – 2012. – **385**. – P. 786–796.
10. Kochubei A. N. A Cauchy problem for evolution equations of fractional order // Different. Equat. – 1989. – **25**. – P. 967–974.
11. Bazhlekova E. The abstract Cauchy problem for the fractional evolution equation // Fract. Calc. Appl. Anal. – 1998. – **1**. – P. 255–270.
12. Bazhlekova E. Subordination principle for fractional evolution equations // Ibid. – 2000. – **3**. – P. 213–230.
13. Arendt W., Batty C. J. K., Hieber M., Neubrander F. Vector-valued Laplace transforms and Cauchy problems. – Basel: Birkhäuser, 2011. – 539 p.
14. Voigt J. On the convex compactness property for the strong operator topology // Note Mat. – 1992. – **12**. – P. 259–269.

15. *Lizama C.* A characterization of uniform continuity for Volterra equations in Hilbert spaces // Proc. Amer. Math. Soc. – 1998. – **126**. – P. 3581–3587.

*Институт математики НАН Украины, Киев  
Московский государственный университет  
им. М. В. Ломоносова, Россия*

*Поступило в редакцию 10.12.2013*

**О. В. Антонюк, А. Н. Кочубей, С. І. Піскаръов**

**Про компактність та рівномірну неперервність розв'язуючої сім'ї  
для рівняння в дробових похідних**

*Досліджено компактність та рівномірну неперервність розв'язуючої сім'ї операторів рівнянь в дробових похідних в банаховому просторі.*

**A. V. Antoniouk, A. N. Kochubei, S. I. Piskarev**

**On the compactness and the uniform continuity of a resolvent family for  
a fractional differential equation**

*The compactness and the uniform continuity for a resolvent family of operators for fractional differential equations in a Banach space are studied.*

## Переопределенные интерполяционные задачи для целых функций экспоненциального типа

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. П. Моторным)

Получены критерии существования целых функций экспоненциального типа не выше  $\varsigma$ , принимающих заданные значения в точках заданной последовательности с плотностью, большей  $\varsigma$ .

Классическая задача интерполяции состоит в отыскании функции данного класса, принимающей в заданных точках — узлах интерполяции — заданные значения. В теории целых функций значительное число работ посвящено различным обобщениям интерполяционной задачи вида

$$f(z_k) = c_k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где  $f$  — целая функция с ограничениями на рост,  $\{z_k\}$  — все нули (или часть нулей) некоторой целой функции  $\varphi$  (см. [1]). Класс функций, в котором ищется решение задачи, задается, как правило, неравенством

$$|f(z)| \leq Ae^{Bp(z)},$$

в котором  $A$  и  $B$  — положительные постоянные, зависящие от функции  $f$ ,  $p$  — неотрицательная субгармоническая функция, обладающая свойствами:

- 1)  $\ln(1 + |z|) = O(p(z))$ ;
- 2) если  $|\zeta - z| \leq 1$ , то  $p(\zeta) \leq Cp(z) + D$  с постоянными  $C$  и  $D$ , не зависящими от  $\zeta$  и  $z$ .

Основным средством исследования задачи (1) и ее аналогов являются интерполяционные ряды и метод  $\bar{\partial}$ -проблемы, основанный на результатах Л. Хермандера [1–3].

Особый интерес представляет интерполяция целыми функциями экспоненциального типа. Ряд известных результатов в этом направлении принадлежит А. О. Гельфонду, В. А. Котельникову, Б. Я. Левину, Картрайт, Боасу и др. (см. [1, 2]). В частности, класс всех целых функций экспоненциального типа, меньшего  $\pi$ , является классом единственности для интерполяционной задачи

$$f(k) = c_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2)$$

Условия разрешимости задачи (2) для этого класса изучались Ло, Вигертом, Фабером, Карлсоном, Полиа, Дюфренуа, Пизо и др. (см., например, [4 гл. 2], [5, §§ 1.1.3, 7.7.2, 7.7.3]). Результаты, полученные этими авторами, показывают, что разрешимость задачи (2) в данном случае эквивалентна возможности аналитического продолжения суммы степенного ряда  $\sum_{k=1}^{\infty} c_k z^k$  в дополнение некоторого компакта.

В настоящей работе получены критерии существования четной целой функции экспоненциального типа не выше  $\varsigma$ , растущей не быстрее многочлена на вещественной оси и принимающей заданные значения в точках заданной последовательности плотности, большей  $\varsigma$ . Такие интерполяционные задачи естественно называть переопределенными. В качестве узлов интерполяции выбираются нули бесселевых и гипергеометрических функций. Отметим, что указанные вопросы тесно связаны с некоторыми аспектами периодических в среднем функций на евклидовых и двухточечно-однородных пространствах (см. [6, ч. 2, гл. 3]).

Перейдем к формулировкам основных результатов. Обозначим  $Z_\varsigma$  — множество всех четных целых функций  $w: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ , удовлетворяющих оценке

$$|w(\lambda)| \leq \gamma(1 + |\lambda|)^m e^{\varsigma|\operatorname{Im}\lambda|}, \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

для некоторых констант  $\gamma > 0$ ,  $m \in \mathbb{Z}$ ,  $\varsigma \geq 0$ .

**Теорема 1.** Пусть  $\tau > \varsigma \geq 0$  и  $\{\nu_l\}_{l=1}^\infty$  — последовательность всех положительных нулей функции Бесселя  $J_{n/2}(\tau z)$ ,  $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$ . Пусть также  $\{\mu_l\}_{l=1}^\infty$  — последовательность комплексных чисел. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

- (i) Существует  $w \in Z_\varsigma$  такая, что  $w(\nu_l) = \mu_l$  для всех  $l$ .
- (ii) Ряды

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\nu_l^{n/2+2} \mu_l}{J_{n/2+1}^2(\nu_l \tau)} J_{n/2}(\nu_l t) \quad \text{и} \quad \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\nu_l \mu_l}{J_{n/2+1}(\nu_l \tau)} |t|^{n/2+1} J_{n/2}(\nu_l |t|)$$

сходятся к нулю на интервалах  $(\varsigma, 2\tau - \varsigma)$  и  $(\varsigma - \tau, \tau - \varsigma)$  в пространствах распределений  $\mathcal{D}'(\varsigma, 2\tau - \varsigma)$  и  $\mathcal{D}'(\varsigma - \tau, \tau - \varsigma)$  соответственно.

Полагая в теореме 1  $n = 1$ ,  $\tau = \pi$  и учитывая, что в этом случае последовательность  $\{\nu_l\}_{l=1}^\infty$  совпадает с натуральным рядом, получаем следующий критерий разрешимости задачи (2) для класса  $Z_\varsigma$ .

**Следствие 1.** Пусть  $0 \leq \varsigma < \pi$  и  $\{\mu_l\}_{l=1}^\infty$  — последовательность комплексных чисел. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

- (i) Существует  $w \in Z_\varsigma$  такая, что  $w(l) = \mu_l$  для любого  $l = 1, 2, \dots$ .
- (ii) Ряды

$$\sum_{l=1}^{\infty} l^3 \mu_l \sin(lt) \quad \text{и} \quad \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l l \mu_l t \sin(lt)$$

сходятся к нулю на интервалах  $(\varsigma, 2\pi - \varsigma)$  и  $(\varsigma - \pi, \pi - \varsigma)$  в пространствах распределений  $\mathcal{D}'(\varsigma, 2\pi - \varsigma)$  и  $\mathcal{D}'(\varsigma - \pi, \pi - \varsigma)$  соответственно.

Перейдем к аналогу теоремы 1 для нулей гипергеометрических функций. Положим

$$\varphi_\lambda^{(\alpha, \beta)}(r) = F\left(\frac{\alpha + \beta + 1 + i\lambda}{2}, \frac{\alpha + \beta + 1 - i\lambda}{2}; \alpha + 1; -\operatorname{sh}^2 r\right), \quad (3)$$

где  $F$  — гипергеометрическая функция Гаусса. Обозначение  $\varphi_\lambda^{(\alpha, \beta)}(r)$  в (3) объясняется тем, что при определенных значениях  $\alpha$  и  $\beta$  эти функции совпадают с зональными сферическими функциями римановых симметрических пространств ранга один отрицательной кривизны, для которых используется это обозначение (см. [7, гл. 4]).

Свойства нулей  $\lambda$  функции  $\varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(r)$  сходны со свойствами нулей бесселевых функций и описаны в следующем утверждении [8 гл. 7].

**Предложение 1.** Для фиксированных  $\alpha \geq 0$ ,  $-1/2 \leq \beta \leq \alpha$ ,  $r > 0$  справедливы следующие утверждения.

(i) Функция  $\varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(r)$  имеет бесконечно много нулей. Все нули  $\varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(r)$  являются вещественными, простыми и расположены симметрично относительно точки  $\lambda = 0$ . Кроме того,  $\varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(r) > 0$  при  $i\lambda \in \mathbb{R}^1$ .

(ii) Пусть  $\lambda_l = \lambda_l(\alpha, \beta, r)$ ,  $l = 1, 2, \dots$ , — последовательность всех положительных нулей  $\varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(r)$ , занумерованная в порядке возрастания, и предположим  $0 < r_1 \leq r \leq r_2$ . Тогда

$$r\lambda_l = \pi \left( \frac{2\alpha + 3}{4} + l + q(r, \alpha, \beta) \right) + \frac{(1/4 - \alpha^2)(\operatorname{ch} r)^2 + (1/4 - \beta^2)(\operatorname{sh} r)^2}{\lambda_l \operatorname{sh} 2r} + O\left(\frac{1}{\lambda_l^3}\right),$$

где  $q(r, \alpha, \beta) \in \mathbb{Z}$  не зависит от  $l$  и постоянная в знаке  $O$  зависит только от  $\alpha, \beta, r_1, r_2$ .

Обозначим через  $\Pi$  множество пар вида  $(n/2 - 1, n/2 - 1)$ ,  $(n - 1, 0)$ ,  $(2n - 1, 1)$ ,  $(7, 3)$ , где  $n = 2, 3, \dots$

**Теорема 2.** Пусть  $(\alpha, \beta) \in \Pi$ ,  $\tau > \varsigma \geq 0$ ,  $\{\nu_l\}_{l=1}^\infty$  — последовательность всех положительных нулей  $\lambda$  функции  $\varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(\tau)$  и  $\{\mu_l\}_{l=1}^\infty$  — последовательность комплексных чисел. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

(i) Существует  $w \in Z_\varsigma$  такая, что  $w(\nu_l) = \mu_l$  для всех  $l$ .

(ii) Ряды

$$\sum_{l=1}^\infty \nu_l \mu_l \left( \left( \frac{d}{d\lambda} \varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(\tau) \right) \Big|_{\lambda=\nu_l} \varphi_{\nu_l}^{(\alpha+1,\beta+1)}(\tau) \right)^{-1} \varphi_{\nu_l}^{(\alpha,\beta)}(t)$$

и

$$\sum_{l=1}^\infty \nu_l \mu_l \left( \left( \frac{d}{d\lambda} \varphi_\lambda^{(\alpha,\beta)}(\tau) \right) \Big|_{\lambda=\nu_l} \right)^{-1} \varphi_{\nu_l}^{(\alpha,\beta)}(t) |t|^{1+2\alpha}$$

сходятся к нулю на интервалах  $(\varsigma, 2\tau - \varsigma)$  и  $(\varsigma - \tau, \tau - \varsigma)$  в пространствах распределений  $\mathcal{D}'(\varsigma, 2\tau - \varsigma)$  и  $\mathcal{D}'(\varsigma - \tau, \tau - \varsigma)$  соответственно.

Стандартные рассуждения, связанные с применением принципа Фрагмена–Линделефа, показывают, что функция  $w$  в теоремах 1, 2 определяется однозначно. Отметим также, что из сходимости рядов в утверждении (ii) этих теорем следует оценка  $\mu_l = O(l^\gamma)$  для некоторого  $\gamma > 0$  (см. [9, ч. 3, доказательство леммы 2.7]).

1. Гольдберг А. А., Левин Б. Я., Островский И. В. Целые и мероморфные функции. — Москва: ВИНТИ, 1991. — С. 5–185. — (Итоги науки и техн. Современ. пробл. матем. Фундамент. направления; Т. 85).
2. Гельфонд А. О. Исчисление конечных разностей. — Москва: Наука, 1967. — 376 с.
3. Хермандер Л. Введение в теорию функций нескольких комплексных переменных. — Москва: Мир, 1968. — 279 с.
4. Маркушевич А. И. Избранные главы теории аналитических функций. — Москва: Наука, 1976. — 191 с.
5. Бибербах Л. Аналитическое продолжение. — Москва: Наука, 1967. — 240 с.
6. Volchkov V. V., Volchkov Vit. V. Offbeat integral geometry on symmetric spaces. — Heidelberg: Springer, 2013. — 592 p.
7. Хелгасон С. Группы и геометрический анализ. — Москва: Мир, 1987. — 735 с.

8. *Volchkov V. V., Volchkov Vit. V.* Harmonic analysis of mean periodic functions on symmetric spaces and the Heisenberg group. – London: Springer, 2009. – 674 p.
9. *Volchkov V. V.* Integral geometry and convolution equations. – Dordrecht: Kluwer, 2003. – 454 p.

*Донецкий национальный университет*

*Поступило в редакцию 04.12.2013*

**В. В. Волчков, Віт. В. Волчков**

**Перевизначені інтерполяційні задачі для цілих функцій експоненціального типу**

*Отримано критерії існування цілих функцій експоненціального типу не вище  $\varsigma$ , що набувають заданих значень у точках заданої послідовності із щільністю, більшою ніж  $\varsigma$ .*

**V. V. Volchkov, Vit. V. Volchkov**

**Overdetermined interpolation problems for entire functions of the exponential type**

*Criteria for the existence of entire functions of the exponential type of at most  $\varsigma$  which take the given values at the points from the given sequence of numbers with a density of more than  $\varsigma$  are obtained.*



С. П. Дегтярев

## Мультипликаторы Фурье в пространствах с частичным свойством Гельдера и их применение к оценкам Шаудера

(Представлено академиком НАН Украины А. М. Ковалевым)

Приведены сравнительно простые достаточные условия на мультипликатор Фурье для того, чтобы он отображал функции, удовлетворяющие условию Гельдера по части переменных в функции, удовлетворяющей условию Гельдера по всем переменным. С использованием этих достаточных условий доказана разрешимость в классах Гельдера начально-краевых задач для линеаризованного уравнения Кана-Хилларда с динамическими граничными условиями двух типов. Получены оценки Шаудера решений указанных задач.

Отправной точкой для написания данной работы послужила статья О. А. Ладыженской [1] (см. также [2]).

Пусть для натурального  $N$

$$\gamma \in (0, 1), \quad \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N), \quad \alpha_1 = 1, \quad \alpha_k \in (0, 1], \quad k = \overline{2, N}. \quad (1)$$

Определим пространство  $C^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N)$  как пространство непрерывных в  $\mathbb{R}^N$  функций  $u(x)$  с конечной нормой

$$\|u\|_{C^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N)} \equiv |u|_{\mathbb{R}^N}^{(\gamma\alpha)} = |u|_{\mathbb{R}^N}^{(0)} + \sum_{i=1}^N \langle u \rangle_{x_i, \mathbb{R}^N}^{(\gamma\alpha_i)}, \quad (2)$$

где

$$|u|_{\mathbb{R}^N}^{(0)} = \sup_{x \in \mathbb{R}^N} |u(x)|, \quad \langle u \rangle_{x_i, \mathbb{R}^N}^{(\gamma\alpha_i)} = \sup_{x \in \mathbb{R}^N, h > 0} \frac{|u(x_1, \dots, x_i + h, \dots, x_N) - u(x)|}{h^{\gamma\alpha_i}}. \quad (3)$$

Наряду с пространствами  $C^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N)$  с показателями  $\gamma\alpha_i < 1$  мы будем также рассматривать пространства  $C^{\bar{l}}(\mathbb{R}^N)$ , где  $\bar{l} = (l_1, l_2, \dots, l_N)$ ,  $l_i$  — произвольные положительные нецелые числа. Норма в этом пространстве определяется равенством

$$\|u\|_{C^{\bar{l}}(\mathbb{R}^N)} \equiv |u|_{\mathbb{R}^N}^{(\bar{l})} = |u|_{\mathbb{R}^N}^{(0)} + \sum_{i=1}^N \langle u \rangle_{x_i, \mathbb{R}^N}^{(l_i)}, \quad (4)$$

$$\langle u \rangle_{x_i, \mathbb{R}^N}^{(l_i)} = \sup_{x \in \mathbb{R}^N, h > 0} \frac{|D_{x_i}^{[l_i]} u(x_1, \dots, x_i + h, \dots, x_N) - D_{x_i}^{[l_i]} u(x)|}{h^{l_i - [l_i]}}, \quad (5)$$

где  $[l_i]$  — целая часть числа  $l_i$ ,  $D_{x_i}^{[l_i]} u$  — производная порядка  $[l_i]$  по переменной  $x_i$  от функции  $u$ . Полунорма (5) может быть определена эквивалентным образом, как

$$\langle u \rangle_{x_i, \mathbb{R}^N}^{(l_i)} \simeq \sup_{x \in \mathbb{R}^N, h > 0} \frac{|\Delta_{h, x_i}^k u(x)|}{h^{l_i}}, \quad k > l_i, \quad (6)$$

где  $\Delta_{h,x_i} u(x) = u(x_1, \dots, x_i + h, \dots, x_N) - u(x)$  — разность от функции  $u(x)$  по переменной  $x_i$  с шагом  $h$ ,  $\Delta_{h,x_i}^k u(x) = \Delta_{h,x_i}(\Delta_{h,x_i}^{k-1} u(x)) = (\Delta_{h,x_i})^k u(x)$  —  $k$  раз примененная разность, т. е. разность степени  $k$ . Отметим, что функции из пространства  $C^{\vec{l}}(\mathbb{R}^N)$  обладают также смешанными производными до определенных порядков, которые удовлетворяют условиям Гельдера по всем переменным с некоторыми показателями — в зависимости от соотношения показателей  $l_i$ .

Определим далее пространство функций  $\mathcal{H}^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N) \subset C^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N) \cap L_2(\mathbb{R}^N)$  как замыкание множества финитных функций  $u(x)$  из  $C^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N)$  в норме

$$\|u\|_{\mathcal{H}^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N)} \equiv \|u\|_{L_2(\mathbb{R}^N)} + \sum_{i=1}^N \langle u \rangle_{x_i, \mathbb{R}^N}^{(\gamma\alpha_i)}. \quad (7)$$

Аналогично определим пространство  $\mathcal{H}^{\vec{l}}(\mathbb{R}^N)$  с произвольными нецелыми положительными  $l_i$  с нормой

$$\|u\|_{\mathcal{H}^{\vec{l}}(\mathbb{R}^N)} \equiv \|u\|_{L_2(\mathbb{R}^N)} + \sum_{i=1}^N \langle u \rangle_{x_i, \mathbb{R}^N}^{(l_i)}. \quad (8)$$

В [1] показано, что  $|u|_{\mathbb{R}^N}^{(0)} \leq C \|u\|_{\mathcal{H}^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N)}$ , так что

$$|u|_{\mathbb{R}^N}^{(\gamma\alpha)} \leq C \|u\|_{\mathcal{H}^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N)}. \quad (9)$$

Здесь и всюду ниже мы будем обозначать через  $C, \nu$  все абсолютные константы либо константы, зависящие только от раз и навсегда зафиксированных данных.

Пусть функция  $\tilde{m}(\xi)$ ,  $\xi \in \mathbb{R}^N$ , определена в  $\mathbb{R}^N$ , измерима и ограничена. Определим оператор  $M: \mathcal{H}^{\gamma\alpha}(\mathbb{R}^N) \rightarrow L_2(\mathbb{R}^N)$  по формуле

$$Mu \equiv F^{-1}(\tilde{m}(\xi)\tilde{u}(\xi)), \quad (10)$$

где для  $u(x) \in L_1(\mathbb{R}^N)$

$$\tilde{u}(\xi) \equiv F(u) = \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ix\xi} u(x) dx \quad (11)$$

преобразование Фурье от функции  $u(x)$ , которое распространено на  $L_2(\mathbb{R}^N)$ ,  $F^{-1}\tilde{u}(\xi)$  — обратное преобразование Фурье от функции  $\tilde{u}(\xi)$ . Так как  $u(x) \in L_2(\mathbb{R}^N)$ , а функция  $\tilde{m}(\xi)$  ограничена, то оператор  $M$  корректно определен, и при этом функция  $\tilde{m}(\xi)$  называется мультипликатором Фурье. Пусть множество переменных  $(\xi_1, \dots, \xi_N) = \xi$  разбито на  $r$  групп длины  $N_i$ ,  $i = \overline{1, r}$ , так что

$$N_1 + \dots + N_r = N,$$

$$\xi = (y_1, \dots, y_r), \quad y_1 = (\xi_1, \dots, \xi_{N_1}), \dots, y_r = (\xi_{N_1+\dots+N_{r-1}+1}, \dots, \xi_N).$$

Пусть далее  $\omega_i$ ,  $i = \overline{1, r}$ , означают мультииндексы длины  $N_i$

$$\omega_1 = (\omega_{1,1}, \dots, \omega_{1,N_1}), \dots, \omega_r = (\omega_{r,1}, \dots, \omega_{r,N_r}), \quad \omega_{i,k} \in \mathbf{N} \cup \{0\},$$

а символ  $D_{y_i}^{\omega_i} \tilde{u}(\xi)$  означает некоторую производную от функции  $\tilde{u}(\xi)$  порядка  $|\omega_i| = \omega_{i,1} + \dots + \omega_{i,N_i}$  по группе переменных  $y_i = (\xi_{k_1}, \dots, \xi_{k_{N_i}})$ , т. е.  $D_{y_i}^{\omega_i} \tilde{u}(\xi) = D_{\xi_{k_1}}^{\omega_{i,1}} \dots D_{\xi_{k_{N_i}}}^{\omega_{i,N_i}} \tilde{u}(\xi)$ . Обозначим для  $\nu > 0$

$$B_\nu = \{\xi \in \mathbb{R}^N : \nu \leq |\xi| \leq \nu^{-1}\}.$$

Пусть функция  $\tilde{m}(\xi) \in C(\mathbb{R}^N \setminus \{0\})$  и ограничена. Пусть  $x \in \mathbb{R}^N$ ,  $K \in (0, N)$  — целое число,  $x = (x^{(1)}, x^{(2)})$ ,  $x^{(1)} = (x_1, \dots, x_K)$ ,  $x^{(2)} = (x_{K+1}, \dots, x_N)$  и аналогично  $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)})$ ,  $\xi^{(1)} = (\xi_1, \dots, \xi_K)$ ,  $\xi^{(2)} = (\xi_{K+1}, \dots, \xi_N)$ . Пусть  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_K)$ ,  $\beta = (\beta_{K+1}, \dots, \beta_N)$ ,  $\alpha_i \in (0, 1]$ ,  $\beta_k > 0$  и  $\gamma \in (0, 1)$ .

Для  $x \in \mathbb{R}^N$  и целого  $j \in \mathbb{Z}$  обозначим

$$A_j x \equiv (2^{j/\alpha_1} x_1, \dots, 2^{j/\alpha_K} x_K, 2^{j/\beta_{K+1}} x_{K+1}, 2^{j/\beta_N} x_N), \quad a_j = \det A_j. \quad (12)$$

Обозначим  $\tilde{m}_j(\xi) = \tilde{m}(\xi) \chi(A_j^{-1} \xi)$ ,  $m_j(x)$  — обратное преобразование Фурье от функции  $\tilde{m}_j(\xi)$ ,

$$n_j(x) = a_j^{-1} m_j(A_j^{-1} x). \quad (13)$$

Пусть с некоторым  $\mu > 0$  выполнены условия

$$\tilde{m}(\xi)|_{\xi^{(1)}=0} = \tilde{m}(0, \xi^{(2)}) \equiv 0, \quad \xi^{(2)} \in \mathbb{R}^{N-K}, \quad (14)$$

$$\int_{\mathbb{R}^N} \left( 1 + \sum_{k=1}^K |x_k|^{\alpha_k \gamma} \right) |n_j(x)| dx \leq \mu, \quad j \in \mathbb{Z}. \quad (15)$$

Пусть, наконец, задана финитная функция  $u(x) \in C_{x^{(1)}}^{\alpha\gamma}(\mathbb{R}^N)$ , т. е.  $u(x)$  имеет компактный носитель в  $\mathbb{R}^N$  и удовлетворяет условиям Гельдера по части переменных

$$\langle u \rangle_{x^{(1)}, \mathbb{R}^N}^{(\alpha\gamma)} = \sum_{k=1}^K \langle u \rangle_{x_k, \mathbb{R}^N}^{(\alpha_k \gamma)} < \infty.$$

Обозначим

$$v(x) \equiv Mu \equiv m(x) * u(x) \equiv F^{-1}(\tilde{m}(\xi) \tilde{u}(\xi)).$$

**Теорема 1.** Пусть выполнены условия (14), (15). Тогда функция  $v(x)$  удовлетворяет условию Гельдера по всем переменным, причем

$$\langle v \rangle_{x^{(1)}, x^{(2)}, \mathbb{R}^N}^{(\alpha\gamma, \beta\gamma)} \leq C \mu \langle u \rangle_{x^{(1)}, \mathbb{R}^N}^{(\alpha\gamma)}, \quad (16)$$

где

$$\langle v \rangle_{x^{(1)}, x^{(2)}, \mathbb{R}^N}^{(\alpha\gamma, \beta\gamma)} = \sum_{k=1}^K \langle v \rangle_{x_k, \mathbb{R}^N}^{(\alpha_k \gamma)} + \sum_{k=K+1}^N \langle v \rangle_{x_k, \mathbb{R}^N}^{(\beta_k \gamma)}.$$

Справедливо также следующее утверждение. Обозначим

$$\mathcal{H}_{x^{(1)}}^{\alpha\gamma}(\mathbb{R}^N) = C_{x^{(1)}}^{\alpha\gamma}(\mathbb{R}^N) \cap L_2(\mathbb{R}^N), \quad \mathcal{H}_{x^{(1)}, x^{(2)}}^{\alpha\gamma, \beta\gamma}(\mathbb{R}^N) = C_{x^{(1)}, x^{(2)}}^{\alpha\gamma}(\mathbb{R}^N) \cap L_2(\mathbb{R}^N) —$$

замыкания множества финитных функций в нормах

$$\|u\|_{\mathcal{H}_{x^{(1)}}^{\alpha\gamma}(\mathbb{R}^N)} \equiv \|u\|_{L_2(\mathbb{R}^N)} + \langle u \rangle_{x^{(1)}, \mathbb{R}^N}^{(\alpha\gamma)}, \quad \|u\|_{\mathcal{H}_{x^{(1)}, x^{(2)}}^{\alpha\gamma, \beta\gamma}(\mathbb{R}^N)} \equiv \|u\|_{L_2(\mathbb{R}^N)} + \langle u \rangle_{x^{(1)}, x^{(2)}, \mathbb{R}^N}^{(\alpha\gamma, \beta\gamma)}.$$

**Теорема 2.** Пусть выполнено условие (14). Пусть далее выполнено условие

$$s_i > \frac{N_i}{p} + \gamma, \quad i = \overline{1, r}, \quad p \in (1, 2]. \quad (17)$$

Пусть еще выполнено условие

$$\sup_{\lambda > 0} \sum_{|\omega_i| \leq s_i} \|D_{y_1}^{\omega_1} D_{y_2}^{\omega_2} \dots D_{y_r}^{\omega_r} \tilde{m}(A_\lambda \xi)\|_{L_p(B_\nu)} \leq \mu. \quad (18)$$

Тогда оператор  $M$  является ограниченным линейным оператором из  $\mathcal{H}_{x^{(1)}}^{\alpha\gamma}(\mathbb{R}^N)$  в  $\mathcal{H}_{x^{(1)}, x^{(2)}}^{\alpha\gamma, \beta\gamma}(\mathbb{R}^N)$ , причем

$$\|Mu\|_{\mathcal{H}_{x^{(1)}, x^{(2)}}^{\alpha\gamma, \beta\gamma}(\mathbb{R}^N)} \leq C\mu \|u\|_{\mathcal{H}_{x^{(1)}}^{\alpha\gamma}(\mathbb{R}^N)}. \quad (19)$$

Приведем применение доказанных результатов к линеаризованному уравнению Кана–Хилларда с двумя типами динамических граничных условий.

Пусть  $\Omega$  — произвольная область в  $\mathbb{R}^N$  с границей  $\Gamma = \partial\Omega$  класса  $C^{4+\gamma}$ ,  $\gamma \in (0, 1)$ ,  $T > 0$ ,  $\Omega_T = \Omega \times [0, T]$ ,  $\Gamma_T = \Gamma \times [0, T]$ . В области  $\Omega_T$  рассмотрим следующую начально-краевую задачу для неизвестной функции  $u(x, t)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \Delta^2 u + \sum_{|\alpha| \leq 3} b_\alpha(x, t) D_x^\alpha u = f(x, t), \quad (x, t) \in \Omega_T, \quad (20)$$

$$\frac{\partial \Delta u}{\partial \bar{n}} \Big|_{x \in \partial\Omega} = g(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma_T, \quad (21)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad t = 0, x \in \overline{\Omega}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a(x, t) \Delta_\Gamma u + \sum_{i=1}^N b_i(x, t) \frac{\partial u}{\partial x_i} + c(x, t) u = h_1(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma_T. \quad (23)$$

Здесь  $\bar{n}$  — внешняя нормаль к поверхности  $\Gamma$ ,  $\Delta_\Gamma$  — оператор Лапласа–Бельтрами на поверхности  $\Gamma$ ,  $b_\alpha(x, t)$ ,  $a(x, t)$ ,  $b_i(x, t)$ ,  $c(x, t)$ ,  $f(x, t)$ ,  $g(x, t)$ ,  $u_0(x)$ ,  $h_1(x, t)$  — заданные функции, причем  $a(x, t) \geq \nu > 0$  и

$$\begin{aligned} b_\alpha &\in C^{\gamma, \gamma/4}(\overline{\Omega_T}), & a, b_i, c &\in C^{2+\gamma, (2+\gamma)/4}(\Gamma_T), & f &\in C^{\gamma, \gamma/4}(\overline{\Omega_T}), \\ g &\in C^{1+\gamma, (1+\gamma)/4}(\Gamma_T), & h_1 &\in C^{2+\gamma, (2+\gamma)/4}(\Gamma_T). \end{aligned} \quad (24)$$

Вместо динамического условия (23) на границе мы будем рассматривать также условие

$$\frac{\partial u}{\partial t} + d(x, t) \frac{\partial u}{\partial \bar{n}} + b(x, t) u = h_2(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma_T, \quad (25)$$

где заданные функции  $d(x, t)$ ,  $b(x, t)$ ,  $h_2(x, t)$  удовлетворяют условиям

$$d(x, t), b(x, t), h_2(x, t) \in C^{3+\gamma, (3+\gamma)/4}(\Gamma_T), \quad d(x, t) \geq \nu > 0. \quad (26)$$

Мы предполагаем также выполненными условия согласования на данные задачи до первого порядка включительно при  $t = 0$ ,  $x \in \partial\Omega$ . А именно, мы предполагаем, во-первых, что

$$\left. \frac{\partial \Delta u_0(x)}{\partial \bar{n}} \right|_{x \in \partial\Omega} = g(x, 0), \quad x \in \Gamma. \quad (27)$$

Кроме того, в случае граничного условия (23) предполагается, что при  $x \in \Gamma$

$$\begin{aligned} \Delta^2 u_0(x) + \sum_{|\alpha| \leq 3} b_\alpha(x, 0) D_x^\alpha u_0 - f(x, 0) = \\ = -a(x, 0) \Delta_\Gamma u_0 + \sum_{i=1}^N b_i(x, 0) \frac{\partial u_0}{\partial x_i} + c(x, 0) u_0 - h_1(x, 0), \end{aligned} \quad (28)$$

а в случае условия (25) мы предполагаем, что при  $x \in \Gamma$

$$\Delta^2 u_0(x) + \sum_{|\alpha| \leq 3} b_\alpha(x, 0) D_x^\alpha u_0 - f(x, 0) = d(x, 0) \frac{\partial u_0}{\partial \bar{n}} + b(x, 0) u_0 - h_2(x, 0). \quad (29)$$

Справедливы следующие утверждения.

**Теорема 3.** При выполнении условий (24), (27), (28) задача (20)–(23) имеет единственное решение из класса  $C^{4+\gamma, (4+\gamma)/4}(\overline{\Omega_T})$  такое, что  $u_t|_{\Gamma_T} \in C^{2+\gamma, (2+\gamma)/4}(\Gamma_T)$ , для которого справедлива оценка

$$|u|_{\overline{\Omega_T}}^{(4+\gamma)} + \left| \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{\Gamma_T} \Big|_{\Gamma_T}^{(2+\gamma)} \leq C_1 (|f|_{\overline{\Omega_T}}^{(\gamma)} + |g|_{\Gamma_T}^{(1+\gamma)} + |h_1|_{\Gamma_T}^{(2+\gamma)}), \quad (30)$$

где константа  $C_1$  зависит только от  $T$ ,  $\nu$ , и норм коэффициентов  $b_\alpha(x, t)$ ,  $a(x, t)$ ,  $b_i(x, t)$ ,  $c(x, t)$  в соответствующих пространствах.

**Теорема 4.** При выполнении условий (24), (26), (27), (29) задача (20)–(22), (25) имеет единственное решение из класса  $C^{4+\gamma, (4+\gamma)/4}(\overline{\Omega_T})$  такое, что  $u_t|_{\Gamma_T} \in C^{3+\gamma, (3+\gamma)/4}(\Gamma_T)$ , для которого справедлива оценка

$$|u|_{\overline{\Omega_T}}^{(4+\gamma)} + \left| \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{\Gamma_T} \Big|_{\Gamma_T}^{(3+\gamma)} \leq C_2 (|f|_{\overline{\Omega_T}}^{(\gamma)} + |g|_{\Gamma_T}^{(1+\gamma)} + |h_2|_{\Gamma_T}^{(3+\gamma)}), \quad (31)$$

где константа  $C_2$  зависит только от  $T$ ,  $\nu$ , и норм коэффициентов  $b_\alpha(x, t)$ ,  $d(x, t)$ ,  $b(x, t)$  в соответствующих пространствах.

1. Ладыженская О. А. Теорема о мультипликаторах в неоднородных пространствах Гельдера и некоторые ее приложения // Зап. науч. семинаров Ст.-Петербург. отд. Мат. ин-та АН. – 2000. – **271**. – С. 156–174.
2. Ladyzhenskaya O. A. On multipliers in Hölder spaces with nonhomogeneous metric // Methods. Appl. Anal. – 2000. – **7**, No 3. – P. 465–472.

Институт прикладной математики  
и механики НАН Украины, Донецк

Поступило в редакцию 05.12.2013

С. П. Дегтярьов

## Мультиплікатори Фур'є в просторах з частковою властивістю Гельдера та їх застосування до оцінок Шаудера

*Наведено порівняно прості достатні умови на мультиплікатор Фур'є для того, щоб він відображав функції, які задовольняють умову Гельдера за частиною змінних у функції, яка задовольняє умову Гельдера за всіма змінними. З використанням цих достатніх умов доведено розв'язність у класах Гельдера початково-крайових задач для лінеаризованого рівняння Кана–Хіллара з динамічними граничними умовами двох типів. Одержано оцінки Шаудера розв'язків вказаних задач.*

S. P. Degtyarev

## Fourier multipliers in the spaces with partial Hölder property and their application to the Schauder estimates

*We give relatively simple sufficient conditions for a Fourier multiplier in order that it maps functions with the Hölder property in a part of the variables into functions with the Hölder property in all variables. With the use of these sufficient conditions, we prove the solvability in Hölder classes of the initial-boundary-value problems for a linearized Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions of two types. For the solutions of these problems, the Schauder estimates are obtained.*

В. Н. Лось, А. А. Мурач

**Параболические смешанные задачи в пространствах обобщенной гладкости***(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины М. Л. Горбачуком)*

*Установлены теоремы о корректной разрешимости общей параболической начально-краевой задачи в некоторых классах гильбертовых пространств обобщенной гладкости. Последняя характеризуется числовыми параметрами и дополнительным функциональным параметром, который медленно меняется на бесконечности по Карамата. В качестве приложения даны новые достаточные условия непрерывности обобщенных производных заданного порядка решения задачи.*

Общие параболические начально-краевые задачи достаточно полно исследованы в классических шкалах функциональных пространств Гельдера-Зигмунда и Соболева [1–5]. Центральное место в теории таких задач занимают теоремы об их корректной разрешимости в подходящих парах пространств, принадлежащих указанным шкалам. Эти теоремы имеют важные применения к исследованию свойств регулярности решений параболической задачи, свойств ее функции Грина и др. (см., например, [6]).

В этой связи представляет интерес исследование свойств параболических задач в шкалах функциональных пространств, более тонко градуированных, чем упомянутые выше классические шкалы. Гильбертовы пространства  $H^\mu := \mathcal{B}_{2,\mu}$ , введенные и систематически изученные Л. Хермандером [7] и Л. Р. Волевичем, Б. П. Панеяхом [8], являются весьма перспективными в этом плане. Для этих пространств показателем регулярности функций/распределений служит не число, а достаточно общий функциональный параметр  $\mu$ , зависящий от частотных переменных (двойственных к пространственным относительно преобразования Фурье). Такие пространства именуют пространствами обобщенной гладкости [9, 10]. Они имеют различные приложения в теории дифференциальных операторов и теории случайных процессов.

Так, недавно В. А. Михайлец и А. А. Мурач [11, 12] построили теорию общих эллиптических дифференциальных операторов и эллиптических краевых задач в гильбертовых шкалах пространств  $H^{s,\varphi} := \mathcal{B}_{2,\mu}$ , для которых показателем регулярности служит функция вида  $\mu(\xi) := (1 + |\xi|^2)^{s/2} \varphi((1 + |\xi|^2)^{1/2})$ . Здесь числовой параметр  $s$  вещественный, а функциональный параметр  $\varphi$  медленно меняется на бесконечности по Й. Карамата. В основе этой теории лежит метод интерполяции гильбертовых пространств с функциональным параметром. Он позволяет вывести теоремы о свойствах эллиптических операторов из соответствующих теорем соболевской теории этих операторов. Метод интерполяции пространств оказывается весьма полезным и в теории параболических дифференциальных уравнений [3].

В настоящей работе мы установим теоремы о корректной разрешимости общей начально-краевой  $2b$ -параболической задачи в классах гильбертовых анизотропных пространств Хермандера  $H^{s,s/(2b),\varphi}$ , где параметры  $s$  и  $\varphi$  такие, как и в упомянутой эллиптической теории. В качестве приложения будут получены новые достаточные условия непрерывности обобщенных производных (заданного порядка) решения задачи.

В двумерном случае общая параболическая задача с нулевыми начальными данными исследована нами в [13, 14].

**1. Постановка задачи.** Пусть произвольно заданы целое число  $n \geq 2$ , вещественное число  $\tau > 0$  и ограниченная область  $G \subset \mathbb{R}^n$  с бесконечно гладкой границей  $\Gamma := \partial G$ . Рассмотрим в цилиндре  $\Omega := G \times (0, \tau)$ , где  $S := \Gamma \times (0, \tau)$  — его боковая поверхность, параболическую начально-краевую задачу:

$$A(x, t, D_x, \partial_t)u(x, t) \equiv \sum_{|\alpha|+2b\beta \leq 2m} a^{\alpha, \beta}(x, t) D_x^\alpha \partial_t^\beta u(x, t) = f(x, t) \quad \text{в } \Omega, \quad (1)$$

$$B_j(x, t, D_x, \partial_t)u(x, t)|_S \equiv \sum_{|\alpha|+2b\beta \leq m_j} b_j^{\alpha, \beta}(x, t) D_x^\alpha \partial_t^\beta u(x, t)|_S = g_j(x, t) \quad (2)$$

при  $x \in \Gamma, \quad 0 < t < \tau$  для каждого  $j \in \{1, \dots, m\}$ ,

$$\partial_t^k u(x, t)|_{t=0} = h_k(x) \quad \text{при } x \in G \quad \text{для каждого } k \in \{0, \dots, \varkappa - 1\}. \quad (3)$$

Здесь  $b, m$  и все  $m_j$  — произвольно заданные целые числа, удовлетворяющие условиям  $m \geq b \geq 1, \varkappa := m/b \in \mathbb{Z}$ , и  $m_j \geq 0$ . Число  $2b$  называется параболическим весом данной задачи. Все коэффициенты дифференциальных выражений  $A := A(x, t, D_x, \partial_t)$  и  $B_j := B_j(x, t, D_x, \partial_t)$  являются бесконечно гладкими комплекснозначными функциями:  $a^{\alpha, \beta} \in C^\infty(\overline{\Omega})$  и  $b_j^{\alpha, \beta} \in C^\infty(\overline{S})$ , где  $\overline{\Omega} := \overline{G} \times [0, \tau]$ ,  $\overline{S} := \Gamma \times [0, \tau]$ .

В работе используются следующие обозначения для частных производных:  $D_x^\alpha := D_1^{\alpha_1} \dots D_n^{\alpha_n}$ ,  $D_k := i\partial/\partial x_k$  и  $\partial_t := \partial/\partial t$ . Здесь  $x = (x_1, \dots, x_n)$  — произвольная точка пространства  $\mathbb{R}^n$ , а  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  — мультииндекс и  $|\alpha| := \alpha_1 + \dots + \alpha_n$ . В формулах (1) и (2) суммирование ведется по целым индексам  $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta \geq 0$ , которые удовлетворяют условиям, написанным под знаком суммы.

Напомним [1, § 9, п. 1], что начально-краевая задача (1)–(3) называется параболической в цилиндре  $\Omega$ , если выполняются следующие два условия.

*Условие 1.* Для произвольных  $x \in \overline{G}, t \in [0, \tau], \xi \in \mathbb{R}^n$  и  $p \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} p \geq 0$ , верно

$$A^{(0)}(x, t, \xi, p) \equiv \sum_{|\alpha|+2b\beta=2m} a^{\alpha, \beta}(x, t) \xi^\alpha p^\beta \neq 0 \quad \text{как только } |\xi| + |p| \neq 0.$$

Произвольно выберем  $x \in \Gamma, t \in [0, \tau]$ , касательный вектор  $\xi \in \mathbb{R}^n$  к границе  $\Gamma$  в точке  $x$  и число  $p \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} p \geq 0$ , такие, что  $|\xi| + |p| \neq 0$ . Пусть  $\nu(x)$  — орт внутренней нормали к границе  $\Gamma$  в точке  $x$ . Из условия 1 следует, что многочлен  $A^{(0)}(x, t, \xi + \zeta\nu(x), p)$  переменного  $\zeta \in \mathbb{C}$  имеет точно  $m$  корней  $\zeta_j^+(x, t, \xi, p), j = 1, \dots, m$ , с положительной мнимой частью и  $m$  корней с отрицательной мнимой частью (с учетом их кратности).

*Условие 2.* При каждом таком выборе  $x, t, \xi$  и  $p$  многочлены

$$B_j^{(0)}(x, t, \xi + \zeta\nu(x), p) \equiv \sum_{|\alpha|+2b\beta=m_j} b_j^{\alpha, \beta}(x, t) (\xi + \zeta\nu(x))^\alpha p^\beta, \quad j = 1, \dots, m,$$

переменного  $\zeta \in \mathbb{C}$  линейно независимы по модулю многочлена  $\prod_{j=1}^m (\zeta - \zeta_j^+(x, t, \xi, p))$ .

Отметим, что условие 1 — это условие  $2b$ -параболичности по И. Г. Петровскому дифференциального уравнения  $Au = f$  в замкнутом цилиндре  $\overline{\Omega}$ , а условие 2 выражает тот факт,



что система граничных дифференциальных операторов  $\{B_1, \dots, B_m\}$  покрывает дифференциальный оператор  $A$  на боковой поверхности  $\bar{S}$  этого цилиндра.

**2. Пространства обобщенной гладкости и уточненная шкала.** Задачу (1)–(3) исследуем в шкалах гильбертовых функциональных пространств  $H^\mu := \mathcal{B}_{2,\mu}$ , введенных независимо Л. Хермандером [7, п. 2.2] и Л. Р. Волевичем, Б. П. Панеяхом [8, § 2, 3]. Показателем регулярности функций (или распределений), образующих пространство  $H^\mu(\mathbb{R}^k)$ , где целое  $k \geq 2$ , служит измеримая по Борелю функция  $\mu: \mathbb{R}^k \rightarrow (0, \infty)$ , удовлетворяющая следующему условию: существуют положительные числа  $c$  и  $l$  такие, что  $\mu(\xi)/\mu(\eta) \leq c(1 + |\xi - \eta|)^l$  для любых  $\xi, \eta \in \mathbb{R}^k$ .

По определению, линейное пространство  $H^\mu(\mathbb{R}^k)$  состоит из всех медленно растущих распределений  $w \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^k)$ , преобразование Фурье  $\hat{w}$  которых является локально интегрируемой по Лебегу функцией и удовлетворяет условию

$$\|w\|_{H^\mu(\mathbb{R}^k)}^2 := \int_{\mathbb{R}^k} \mu^2(\xi) |\hat{w}(\xi)|^2 d\xi < \infty.$$

(В работе распределения/функции предполагаются комплекснозначными.) Это пространство гильбертово относительно введенной нормы  $\|w\|_{H^\mu(\mathbb{R}^k)}$ .

Нам понадобятся следующие версии пространства  $H^\mu(\mathbb{R}^k)$  для произвольного открытого множества  $V \neq \emptyset$ . Линейное пространство  $H^\mu(V)$  состоит, по определению, из сужений  $u = w \upharpoonright V$  всех распределений  $w \in H^\mu(\mathbb{R}^k)$  на множество  $V$ . В этом пространстве задана норма по формуле

$$\|u\|_{H^\mu(V)} := \inf\{\|w\|_{H^\mu(\mathbb{R}^k)} : w \in H^\mu(\mathbb{R}^k), u = w \upharpoonright V\}.$$

Линейное пространство  $H_+^\mu(V)$  состоит, по определению, из сужений  $u = w \upharpoonright V$  всех распределений  $w \in H^\mu(\mathbb{R}^k)$ , равных нулю при  $x_k < 0$ . Здесь  $w = w(x', x_k)$ , где  $x' = (x_1, \dots, x_{k-1}) \in \mathbb{R}^{k-1}$  и  $x_k \in \mathbb{R}$ . В этом пространстве определена норма по формуле

$$\|u\|_{H_+^\mu(V)} := \inf\{\|w\|_{H^\mu(\mathbb{R}^k)} : w \in H^\mu(\mathbb{R}^k), w(x', x_k) \equiv 0 \text{ при } x_k < 0, u = w \upharpoonright V\}.$$

Оно понадобится в случае, когда множество  $V$  примыкает к евклидовому полупространству, заданному условием  $x_k < 0$ . Пространства  $H^\mu(V)$  и  $H_+^\mu(V)$  гильбертовы.

Для удобства обозначений в п. 2 положим  $\gamma := 1/(2b)$ . Будем использовать показатели регулярности вида

$$\mu(\xi', \xi_k) = (1 + |\xi'|^2 + |\xi_k|^{2\gamma})^{s/2} \varphi((1 + |\xi'|^2 + |\xi_k|^{2\gamma})^{1/2}), \quad (4)$$

где  $\xi' \in \mathbb{R}^{k-1}$  и  $\xi_k \in \mathbb{R}$  — аргументы функции  $\mu$ . Здесь числовой параметр  $s$  вещественный, а функциональный параметр  $\varphi$  пробегает класс  $\mathcal{M}$ . Последний состоит из всех измеримых по Борелю функций  $\varphi: [1, \infty) \rightarrow (0, \infty)$ , которые удовлетворяют следующим двум условиям:

- а) обе функции  $\varphi$  и  $1/\varphi$  ограничены на каждом отрезке  $[1, b]$ , где  $1 < b < \infty$ ;
- б) функция  $\varphi$  медленно меняется по Й. Карамата на бесконечности, а именно,  $\varphi(\lambda r)/\varphi(r) \rightarrow 1$  при  $r \rightarrow \infty$  для каждого  $\lambda > 0$ .

Теория медленно меняющихся функций (на бесконечности) изложена, например, в монографии [15]. Их важным примером служат функции вида

$$\varphi(r) := (\log r)^{\theta_1} (\log \log r)^{\theta_2} \dots \underbrace{(\log \dots \log r)^{\theta_k}}_{k \text{ раз}} \quad \text{при } r \gg 1,$$

где параметры  $k \in \mathbb{N}$  и  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k \in \mathbb{R}$  произвольны.

Пусть  $s \in \mathbb{R}$  и  $\varphi \in \mathcal{M}$ . Решение  $u$  начально-краевой задачи (1)–(3) и правые части  $f$  уравнения (1) будем рассматривать в гильбертовых функциональных пространствах  $H^{s,s\gamma,\varphi}(\Omega) := H^\mu(\Omega)$  и  $H_+^{s,s\gamma,\varphi}(\Omega) := H_+^\mu(\Omega)$ , где показатель  $\mu$  определен по формуле (4), в которой  $k := n + 1$ . (Последнее пространство понадобится в случае, когда все  $h_k = 0$ .)

Если  $\varphi(r) \equiv 1$ , то  $H^{s,s\gamma,\varphi}(\Omega)$  становится анизотропным гильбертовым пространством Соболева порядка  $(s, s\gamma)$ ; обозначим его через  $H^{s,s\gamma}(\Omega)$ . Здесь  $s$  — показатель регулярности распределения  $u = u(x, t)$  по пространственной переменной  $x \in G$ , а  $s\gamma$  — показатель регулярности по временной переменной  $t \in (0, \tau)$ . В общей ситуации, когда  $\varphi \in \mathcal{M}$  произвольно, выполняются непрерывные и плотные вложения

$$H^{s_1, s_1\gamma}(\Omega) \hookrightarrow H^{s, s\gamma, \varphi}(\Omega) \hookrightarrow H^{s_0, s_0\gamma}(\Omega) \quad \text{при} \quad s_0 < s < s_1. \quad (5)$$

Рассмотрим класс гильбертовых функциональных пространств

$$\{H^{s, s\gamma, \varphi}(\Omega) : s \in \mathbb{R}, \varphi \in \mathcal{M}\}. \quad (6)$$

Вложения (5) показывают, что в (6) функциональный параметр  $\varphi$  определяет дополнительную гладкость по отношению к основной анизотропной  $(s, s\gamma)$ -гладкости. Если  $\varphi(r) \rightarrow \infty$  (либо  $\varphi(r) \rightarrow 0$ ) при  $r \rightarrow \infty$ , то  $\varphi$  определяет позитивную (либо негативную) дополнительную гладкость. Иначе говоря,  $\varphi$  уточняет основную гладкость  $(s, s\gamma)$ . Поэтому естественно именовать класс пространств (6) уточненной анизотропной соболевской шкалой на  $\Omega$  (коротко — уточненной шкалой). Здесь  $\gamma$  служит параметром анизотропии пространств, образующих эту шкалу.

Определим гильбертовы пространства, в которых рассматриваются правые части краевых и начальных условий задачи (1)–(3).

Пространства, к которым принадлежат правые части  $g_j$  краевых условий (2), заданы на боковой поверхности  $S = \Gamma \times (0, \tau)$  цилиндра  $\Omega$  и определяются с помощью локальных координат следующим образом. Для открытой полосы  $\Pi := \mathbb{R}^{n-1} \times (0, \tau)$  рассмотрим гильбертовы пространства  $H^{s, s\gamma, \varphi}(\Pi) := H^\mu(\Pi)$  и  $H_+^{s, s\gamma, \varphi}(\Pi) := H_+^\mu(\Pi)$ , где показатель  $\mu$  определен по формуле (4), в которой  $k := n$ . Выберем какой-либо конечный атлас из  $C^\infty$ -структуры на замкнутом многообразии  $\Gamma$ , образованный локальными картами  $\theta_j : \mathbb{R}^{n-1} \leftrightarrow \Gamma_j$ , где  $j = 1, \dots, \lambda$ . Здесь открытые множества  $\Gamma_1, \dots, \Gamma_\lambda$  составляют покрытие многообразия  $\Gamma$ . Кроме того, произвольно выберем функции  $\chi_j \in C^\infty(\Gamma)$ ,  $j = 1, \dots, \lambda$ , такие, что  $\text{supp} \chi_j \subset \Gamma_j$  и  $\sum_{j=1}^{\lambda} \chi_j \equiv 1$  на  $\Gamma$ .

По определению, линейное пространство  $H^{s, s\gamma, \varphi}(S)$  состоит из всех распределений  $v \in \mathcal{D}'(S)$  на многообразии  $S$  таких, что для каждого номера  $j \in \{1, \dots, \lambda\}$  распределение  $v_j(x, t) := \chi_j(\theta_j(x))v(\theta_j(x), t)$  аргументов  $x \in \Gamma$  и  $t \in (0, \tau)$  принадлежит к  $H^{s, s\gamma, \varphi}(\Pi)$ . В пространстве  $H^{s, s\gamma, \varphi}(S)$  задана норма по формуле

$$\|v\|_{H^{s, s\gamma, \varphi}(S)} := \left( \sum_{j=1}^{\lambda} \|v_j\|_{H^{s, s\gamma, \varphi}(\Pi)}^2 \right)^{1/2}.$$

Оно гильбертово относительно этой нормы.

Заменив в этом определении пространство  $H^{s, s\gamma, \varphi}(\Pi)$  на  $H_+^{s, s\gamma, \varphi}(\Pi)$ , получим определение гильбертового пространства  $H_+^{s, s\gamma, \varphi}(S)$ .

Введенные пространства  $H^{s,s\gamma,\varphi}(S)$  и  $H_+^{s,s\gamma,\varphi}(S)$  не зависят (с точностью до эквивалентности норм) от указанного выбора атласа и разбиения единицы на  $\Gamma$ .

Наконец, укажем пространства, в которых рассматриваются правые части  $h_k$  начальных условий (3). Это гильбертовы пространства  $H^{s,\varphi}(G) := H^\mu(G)$  с показателем  $\mu(\xi) := (1 + |\xi|^2)^{s/2} \varphi((1 + |\xi|^2)^{1/2})$  аргумента  $\xi \in \mathbb{R}^n$ . Их систематически использовали В. А. Михайлец и А. А. Мурач в теории эллиптических краевых задач [11, 12].

Если  $\varphi \equiv 1$ , то введенные выше пространства становятся соболевскими пространствами (анизотропными на  $\Omega$  и  $S$  либо изотропными на  $G$ ). В этом случае будем опускать индекс  $\varphi$  в обозначениях пространств.

**3. Основные результаты** работы составляют теоремы об изоморфизмах, порожденных параболической начально-краевой задачей (1)–(3) в уточненной шкале. Сформулируем их.

Пусть  $\sigma_0$  обозначает наименьшее целое число, удовлетворяющее условиям

$$\sigma_0 \geq 2m, \quad \sigma_0 \geq m_j + 1 \quad \text{для всех} \quad j \in \{1, \dots, m\} \quad \text{и} \quad \frac{\sigma_0}{2b} \in \mathbb{Z}.$$

В частности, если  $m_j \leq 2m - 1$  для каждого  $j \in \{1, \dots, m\}$ , то  $\sigma_0 = 2m$ .

Представляет отдельный интерес [1, § 9] задача (1)–(3) в случае нулевых начальных данных, т. е. когда все  $h_k \equiv 0$ . В этом случае свяжем с ней линейное отображение

$$u \mapsto (Au, Bu) := (Au, B_1u, \dots, B_mu), \quad u \in C_+^\infty(\bar{\Omega}). \quad (7)$$

Здесь  $C_+^\infty(\bar{\Omega})$  — линейное пространство всех функций  $u = u(x, t)$  класса  $C^\infty(\bar{\Omega})$  таких, что  $\partial_t^\beta u(x, 0) = 0$  для всех  $x \in \bar{G}$  и  $\beta \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ .

**Теорема 1.** Пусть произвольно заданы параметры: вещественное число  $s > \sigma_0$  и функция  $\varphi \in \mathcal{M}$ . Тогда отображение (7) продолжается единственным образом (по непрерывности) до изоморфизма

$$(A, B): H_+^{s,s/(2b),\varphi}(\Omega) \leftrightarrow H_+^{s-2m,(s-2m)/(2b),\varphi}(\Omega) \oplus \bigoplus_{j=1}^m H_+^{s-m_j-1/2,(s-m_j-1/2)/(2b),\varphi}(S). \quad (8)$$

В общем случае ненулевых начальных данных свяжем с задачей (1)–(3) линейное отображение

$$u \mapsto \Lambda u := (Au, B_1u, \dots, B_mu, u \upharpoonright \bar{G}, \dots, (\partial_t^{\kappa-1} u) \upharpoonright \bar{G}), \quad u \in C^\infty(\bar{\Omega}). \quad (9)$$

**Теорема 2.** Пусть произвольно заданы параметры: вещественное число  $s > \sigma_0$  и функция  $\varphi \in \mathcal{M}$ . Предположим, что  $s + 1/2 \notin \mathbb{Z}$  и  $s/(2b) + 1/2 \notin \mathbb{Z}$ . Тогда отображение (9) продолжается единственным образом (по непрерывности) до изоморфизма

$$\Lambda: H^{s,s/(2b),\varphi}(\Omega) \leftrightarrow \mathcal{Q}^{s-2m,(s-2m)/(2b),\varphi}. \quad (10)$$

Здесь  $\mathcal{Q}^{s-2m,(s-2m)/(2b),\varphi}$  обозначает подпространство пространства

$$\mathcal{H}^{s-2m,(s-2m)/(2b),\varphi} := H^{s-2m,(s-2m)/(2b),\varphi}(\Omega) \oplus \bigoplus_{j=1}^m H^{s-m_j-1/2,(s-m_j-1/2)/(2b),\varphi}(S) \oplus \bigoplus_{k=0}^{\kappa-1} H^{s-2bk-b,\varphi}(G),$$

образованное всеми векторами

$$F := (f, g_1, \dots, g_m, h_0, \dots, h_{\varkappa-1}) \in \mathcal{H}^{s-2m, (s-2m)/(2b), \varphi},$$

которые удовлетворяют следующему условию согласования правых частей задачи (1)–(3). Для вектора  $F$  существует функция  $v = v(x, t)$  класса  $H^{s, s/(2b), \varphi}(\Omega)$  такая, что

$$f - Av \in H_+^{s-2m, (s-2m)/(2b), \varphi}(\Omega),$$

$$g_j - B_j v \in H_+^{s-m_j-1/2, (s-m_j-1/2)/(2b), \varphi}(S) \quad \text{для всех } j \in \{1, \dots, m\},$$

$$h_k = \partial_t^k v|_{t=0} \quad \text{для всех } k \in \{0, \dots, \varkappa-1\}.$$

Это условие согласования можно сформулировать в эквивалентном и конструктивном виде без привлечения уточненной шкалы пространств (см., например, [2, с. 707]). А именно, оно состоит в том, что производные  $\partial_t^k u(x, t)|_{t=0}$ , которые можно вычислить из параболического уравнения (1) и начальных данных (3), должны удовлетворять при  $x \in \Gamma$  краевым условиям (2) и соотношениям, получающимся в результате дифференцирования краевых условий по переменной  $t$ .

Отметим, что теорема 2 верна и в случае, когда параметр  $s > \sigma_0$  удовлетворяет одному из условий  $s + 1/2 \in \mathbb{Z}$  и  $s/(2b) + 1/2 \in \mathbb{Z}$ , если гильбертово пространство  $\mathcal{Q}^{s-2m, (s-2m)/(2b), \varphi}$  определить с помощью интерполяции

$$\mathcal{Q}^{s-2m, (s-2m)/(2b), \varphi} := [\mathcal{Q}^{s-2m-\varepsilon, (s-2m-\varepsilon)/(2b), \varphi}, \mathcal{Q}^{s-2m+\varepsilon, (s-2m+\varepsilon)/(2b), \varphi}]_{1/2}.$$

Здесь число  $\varepsilon \in (0, 1/2)$ , а правая часть равенства есть результат интерполяции указанной пары гильбертовых пространств с числовым параметром  $1/2$ .

В соболевском случае  $\varphi \equiv 1$  теоремы 1 и 2 известны. Теорема 2 доказана М. С. Аграновичем и М. И. Вишиком [1, теорема 12.1] в предположении, что число  $s/(2b)$  целое (их результат охватывает предельный случай  $s = \sigma_0$ ). Это предположение можно опустить, что следует из результата Н. В. Житарашу и С. Д. Эйдельмана [4, теорема 5.7]. Теорема 1 является важным частным случаем теоремы 2, если  $s + 1/2 \notin \mathbb{Z}$  и  $s/(2b) + 1/2 \notin \mathbb{Z}$ .

**4. Применение.** В силу упомянутой теоремы Аграновича–Вишика каждому вектору  $F \in \mathcal{Q}^{\sigma_0-2m, (\sigma_0-2m)/(2b)}$  соответствует единственный прообраз  $u \in H^{\sigma_0, \sigma_0/(2b)}(\Omega)$  при отображении (10). Эту функцию-прообраз  $u$  называем обобщенным решением задачи (1)–(3) с правой частью  $F = (f, g_1, \dots, g_m, h_0, \dots, h_{\varkappa-1})$ .

В качестве применения теоремы 2 дадим следующее достаточное условие непрерывности обобщенного решения  $u$  и его обобщенных частных производных заданного порядка.

**Теорема 3.** Пусть произвольно выбрано целое число  $q \geq 0$ . Предположим, что функция  $u \in H^{\sigma_0, \sigma_0/(2b)}(\Omega)$  является обобщенным решением задачи (1)–(3), правые части которой удовлетворяют условию

$$F = (f, g_1, \dots, g_m, h_0, \dots, h_{\varkappa-1}) \in \mathcal{Q}^{s-2m, (s-2m)/(2b), \varphi},$$

где  $s := 2bq + b + n/2 > \sigma_0$ , а функциональный параметр  $\varphi \in \mathcal{M}$  такой, что

$$\int_1^\infty \frac{dt}{t\varphi^2(t)} < \infty.$$

Тогда решение  $u(x, t)$  и все его обобщенные частные производные  $D_x^\alpha \partial_t^\beta u(x, t)$ , для которых  $|\alpha| + 2b\beta \leq 2bq$ , являются непрерывными функциями на множестве  $\bar{\Omega}$ .

Если сформулировать аналог теоремы 3 для анизотропных соболевских пространств (случай  $\varphi \equiv 1$ ), то придется заменить ее условие на более сильное: правые части задачи (1)–(3) удовлетворяют включению  $F \in \mathcal{Q}^{s-2m, (s-2m)/(2b)}$  при некотором  $s > 2bq + b + n/2$ . Это существенно огрубляет результат.

**5. Обоснование результатов.** Теорему 1 можно вывести из теоремы Аграновича–Вишика [1, теорема 12.1] посредством интерполяции с функциональным параметром анизотропных пространств Соболева. Определение и свойства этой интерполяции приведены, например, в [11, пп. 1.1, 2.4.2].

Наметим доказательство теоремы 1. Выберем число  $\sigma_1 > s$  такое, что  $\sigma_1/(2b) \in \mathbb{Z}$ . В силу упомянутой теоремы Аграновича–Вишика имеем изоморфизм (8) при  $\varphi \equiv 1$  и каждом  $s \in \{\sigma_0, \sigma_1\}$ . Определим интерполяционный функциональный параметр  $\psi$  по формулам  $\psi(r) := r^{(s-\sigma_0)/(\sigma_1-\sigma_0)} \varphi(r^{1/(\sigma_1-\sigma_0)})$  при  $r \geq 1$  и  $\psi(r) := \varphi(1)$  при  $0 < r < 1$ . Применив интерполяцию с этим параметром к анизотропным соболевским пространствам, в которых действуют изоморфизмы (8) при  $\varphi \equiv 1$  и  $s \in \{\sigma_0, \sigma_1\}$ , получим еще один изоморфизм

$$\begin{aligned} (A, B): [H_+^{\sigma_0, \sigma_0/(2b)}(\Omega), H_+^{\sigma_1, \sigma_1/(2b)}(\Omega)]_\psi &\leftrightarrow \\ &\leftrightarrow [H_+^{\sigma_0-2m, (\sigma_0-2m)/(2b)}(\Omega), H_+^{\sigma_1-2m, (\sigma_1-2m)/(2b)}(\Omega)]_\psi \oplus \\ &\oplus \bigoplus_{j=1}^m [H_+^{\sigma_0-m_j-1/2, (\sigma_0-m_j-1/2)/(2b)}(S), H_+^{\sigma_1-m_j-1/2, (\sigma_1-m_j-1/2)/(2b)}(S)]_\psi. \end{aligned}$$

Здесь выражение  $[E_1, E_2]_\psi$  обозначает гильбертово пространство, полученное в результате интерполяции с параметром  $\psi$  пары гильбертовых пространств  $E_1$  и  $E_2$ . Можно показать, что интерполяционные пространства, в которых действует этот изоморфизм, совпадают (с точностью до эквивалентности норм) с соответствующими пространствами, фигурирующими в (8). Тем самым будет доказана теорема 1.

Так, исходя из определения интерполяции, непосредственно проверяется формула

$$[H^{\sigma_0, \sigma_0/(2b)}(\mathbb{R}^{n+1}), H^{\sigma_1, \sigma_1/(2b)}(\mathbb{R}^{n+1})]_\psi = H^{s, s/(2b), \varphi}(\mathbb{R}^{n+1}).$$

Отсюда выводятся необходимые интерполяционные формулы с помощью общих методов интерполяции пространств, заданных в евклидовых областях и на многообразиях (см., например, [11, пп. 2.1.2, 3.2]). В случае  $n = 1$  соответствующие доказательства даны нами в [13, п. 5].

Теорема 2 выводится из теоремы 1 согласно схеме доказательства теоремы 10.1 статьи М.С. Аграновича и М.И. Вишика [1]. При этом решение задачи (1)–(3) ищется в виде  $u = v + w$ , где функция  $v \in H^{s, s/(2b), \varphi}(\Omega)$  фигурирует в условии согласования правых частей этой задачи, а функция  $w \in H_+^{s, s/(2b), \varphi}(\Omega)$  является решением краевой задачи  $Aw = f - Av$  в  $\Omega$  и  $B_j w = g_j - B_j v$  на  $S$  для каждого  $j \in \{1, \dots, m\}$ . Функцию  $v$  можно выбрать так, чтобы выполнялась оценка

$$\|v\|_{H^{s, s/(2b), \varphi}(\Omega)} \leq c \|f\|_{H^{s-2m, (s-2m)/(2b), \varphi}(\Omega)} + c \sum_{k=0}^{m-1} \|h_k\|_{H^{s-2bk-b, \varphi}(G)}$$

с некоторым числом  $c > 0$ , не зависящим от  $v$  и правых частей задачи. Требуемый изоморфизм (10) следует из этой оценки и теоремы 1.

Теорема 3 вытекает из теоремы 2, в силу которой  $u \in H^{s,s/(2b),\varphi}(\Omega)$ , и некоторой версии теоремы вложения Л. Хермандера [7, теорема 2.2.7]. Согласно этой версии [14, п. 5], всякая функция  $u \in H^{s,s/(2b),\varphi}(\Omega)$ , где параметры  $s$  и  $\varphi$  удовлетворяют условию теоремы 3, имеет свойства гладкости, указанные в заключении этой теоремы.

1. Агранович М. С., Вишик М. И. Эллиптические задачи с параметром и параболические задачи общего вида // Успехи мат. наук. – 1964. – **19**, № 3. – С. 53–161.
2. Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. – Москва: Наука, 1967. – 736 с.
3. Lions J.-L., Magenes E. Non-homogeneous boundary-value problems and applications. Vol. 2. – Berlin: Springer, 1972. – xi+242 p.
4. Житарашиу Н. В., Эйдельман С. Д. Параболические граничные задачи. – Кишинев: Штиинца, 1992. – 328 с.
5. Eidel'man S. D. Parabolic equations // Encycl. Math. Sci. Vol. 63. Partial differential equations, VI. – Berlin: Springer, 1994. – P. 205–316.
6. Ивасишвиц С. Д. Матрицы Грина параболических граничных задач. – Киев: Выща шк., 1990. – 200 с.
7. Hörmander L. Linear partial differential operators. – Berlin: Springer, 1963. – 285 p.
8. Волевич Л. Р., Панеях Б. П. Некоторые пространства обобщенных функций и теоремы вложения // Успехи мат. наук. – 1965. – **20**, № 1. – С. 3–74.
9. Лизоркин П. И. Пространства обобщенной гладкости // Трибель Х. Теория функциональных пространств. – Москва: Мир, 1986. – С. 381–415.
10. Farkas W., Leopold H.-G. Characterisations of function spaces of generalized smoothness // Ann. Mat. Pura Appl. – 2006. – **185**, No 1. – P. 1–62.
11. Михайлец В. А., Мурач А. А. Пространства Хермандера, интерполяция и эллиптические задачи. – Киев: Ин-т математики НАН Украины, 2010. – 372 с. – (Доступно как arXiv: 1106.3214.).
12. Mikhailets V. A., Murach A. A. The refined Sobolev scale, interpolation, and elliptic problems // Banach J. Math. Anal. – 2012. – **6**, No 2. – P. 211–281.
13. Los V., Murach A. A. Parabolic problems and interpolation with a function parameter // Meth. Funct. Anal. Topol. – 2013. – **19**, No 2. – P. 146–160.
14. Лось В. М., Мурач О. О. Про гладкість розв'язків параболических мішаних задач // Зб. праць Ін-ту математики НАН України. – 2013. – **10**, № 2. – С. 219–234.
15. Сенета Е. Правильно меняющиеся функции. – Москва: Наука, 1985. – 144 с.

Черниговский национальный  
технологический университет  
Институт математики НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 04.02.2014

В. М. Лось, О. О. Мурач

## Параболічні мішані задачі у просторах узагальненої гладкості

Встановлено теореми про коректну розв'язність загальної параболической початково-крайової задачі у деяких класах гільбертових просторів узагальненої гладкості. Остання характеризується числовими параметрами і додатковим функціональним параметром, який повільно змінюється на нескінченності за Караматою. Як застосування наведені нові достатні умови неперервності узагальнених похідних заданого порядку розв'язку задачі.

V. N. Los, A. A. Murach

### Parabolic mixed problems in spaces of generalized smoothness

*We prove theorems on a well-posedness of a general parabolic initial-boundary-value problem in some classes of Hilbert spaces of generalized smoothness. The latter is characterized by number parameters and a supplementary function parameter that varies slowly at infinity in Karamata's sense. As an application, we give new sufficient conditions under which some generalized derivatives of a solution to the problem should be continuous.*



## Група точкових симетрій системи вільних рівнянь другого порядку

(Представлено членом-кореспондентом НАН України А. Г. Нікітіним)

Доведено, що повною групою точкових симетрій системи вільних звичайних диференціальних рівнянь другого порядку є загальна проективна група, що діє у просторі незалежних і залежних змінних.

Групові властивості звичайних диференціальних рівнянь (ЗДР) добре вивчені, чого, на жаль, не можна сказати про системи ЗДР. Важливим результатом про розмірність максимальних алгебр інваріантності систем ЗДР другого порядку є твердження, одержане Л. Маркусом [1, с. 68–69]. А саме, ним доведено, що для будь-якої системи ЗДР другого порядку

$$\mathbf{x}_{tt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{x}_t), \quad (1)$$

де  $\mathbf{x} = (x^1(t), \dots, x^n(t))^T$ ,  $\mathbf{x}_t = d\mathbf{x}/dt$ ,  $\mathbf{x}_{tt} = d\mathbf{x}_t/dt$ , розмірність її максимальної алгебри інваріантності не перевищує  $(n+2)^2 - 1$ . Пізніше це твердження було перевідкрито у роботі [2]. Необхідну та достатню умову зведення лінійних систем вигляду (1) до системи вільних рівнянь другого порядку

$$\mathbf{x}_{tt} = 0 \quad (2)$$

отримано в [3]. Відзначимо, що система (2) інваріантна відносно алгебри  $\mathfrak{sl}(n+2, \mathbb{F})$  з базисними елементами (див. [2])

$$\partial_t, \quad \partial_a, \quad t\partial_t, \quad x^a\partial_t, \quad t\partial_a, \quad x^a\partial_b, \quad tx^a\partial_t + x^a x^c\partial_c, \quad t^2\partial_t + tx^c\partial_c,$$

де  $\mathbb{F} = \mathbb{R}$  або  $\mathbb{F} = \mathbb{C}$  для дійсного або комплексного випадку відповідно. Тут і далі  $a, b, c, i = \overline{1, n}$ ,  $\mu, \nu, \sigma, \sigma' = \overline{0, n}$ , і за індексами, що повторюються, розуміємо підсумовування за всіма їх можливими значеннями, а  $\partial_t = \partial/\partial t$ ,  $\partial_a = \partial/\partial x^a$ . Нижні індекси функцій означають диференціювання за відповідними змінними. Питання еквівалентності систем (1) і (2) відносно точкових перетворень розглянуто Дж. Меркером у роботі [4]. Усі вищенаведені результати для систем ЗДР другого порядку є нетривіальними узагальненнями класичних результатів С. Лі [5] щодо ЗДР другого порядку. Більш детальний огляд відомих результатів щодо групового аналізу систем ЗДР другого порядку наведено в [6].

Основним результатом цієї роботи є строге доведення нижченаведеної теореми.

**Теорема.** *Повною групою точкових симетрій системи (2) є загальна проективна група  $\mathrm{PGL}(n+2, \mathbb{F})$  у просторі  $\mathbb{F}^{n+1}$ , що складається з невідроджених проективних перетворень*

$$\tilde{x}^\mu = \frac{\alpha_{\mu,0}x^0 + \dots + \alpha_{\mu,n}x^n + \alpha_{\mu,n+1}}{\beta_0x^0 + \dots + \beta_nx^n + \beta_{n+1}}, \quad (3)$$



де  $\alpha_{0,0}, \dots, \alpha_{n,n+1}$  та  $\beta_0, \dots, \beta_{n+1}$  — групові параметри, причому один з цих параметрів є несуттєвим, а  $x^0 = t$ .

Той факт, що система (2) інваріантна відносно групи  $\text{PGL}(n+2, \mathbb{F})$ , давно відомий (див., наприклад, [2]). Його можна довести, відновивши групу  $\text{PGL}(n+2, \mathbb{F})$  з вищевказаної алгебри векторних полів  $\mathfrak{sl}(n+2, \mathbb{F})$ . У дійсному випадку необхідно також врахувати, додатково до неперервної компоненти одиниці, очевидне дискретне перетворення, що відповідає заміні знаку однієї зі змінних. Проблема полягає в тому, щоб показати, що перетворення вигляду (3) вичерпують усі можливі точкові симетрії системи (2).

**Доведення теореми.** Використаємо прямий метод знаходження точкових симетрій [7]. Припустимо, що заміна змінних

$$\tilde{t} = T(t, \mathbf{x}), \quad \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{X}(t, \mathbf{x})$$

зводить вихідну систему (2) до тієї ж системи  $\tilde{\mathbf{x}}_{\tilde{t}\tilde{t}} = \mathbf{0}$  у нових змінних  $(\tilde{t}, \tilde{\mathbf{x}})$  і якобіан перетворення  $J = |\partial(T, \mathbf{X})/\partial(t, \mathbf{x})|$  не дорівнює нулю. Запишемо вираз для другої похідної  $\tilde{\mathbf{x}}_{\tilde{t}\tilde{t}}$  у старих змінних  $(t, \mathbf{x})$ :

$$\tilde{\mathbf{x}}_{\tilde{t}\tilde{t}} = \frac{1}{D_t T} D_t \left( \frac{D_t \mathbf{X}}{D_t T} \right),$$

де  $D_t$  — оператор повної похідної за змінною  $t$ ,  $D_t = \partial_t + x_t^a \partial_{x^a} + x_{tt}^a \partial_{x_t^a} + \dots$ . Підставивши цей вираз у систему (2) та перейшовши на її многовид, отримаємо систему визначальних рівнянь

$$(T_t + x_t^c T_c)(X_{tt}^i + 2x_t^a X_{ta}^i + x_t^a x_t^b X_{ab}^i) = (X_t^i + x_t^a X_a^i)(T_{tt} + 2x_t^b T_{tb} + x_t^b x_t^c T_{bc}) \quad (4)$$

для знаходження невідомих функцій  $T$  та  $\mathbf{X}$ , яку необхідно додатково розщепити за похідними  $x_t^a$ . Введемо позначення  $\hat{D}_t = \partial_t + x_t^a \partial_{x^a}$  для оператора повної похідної за змінною  $t$  на многовиді системи (2), при цьому  $\hat{D}_t^2 = \partial_{tt} + 2x_t^a \partial_{x^a} + x_t^a x_t^b \partial_{x^a x^b}$ . Використавши це позначення, запишемо систему рівнянь (4) у більш компактній формі

$$(\hat{D}_t T) \hat{D}_t^2 X^i = (\hat{D}_t X^i) \hat{D}_t^2 T. \quad (5)$$

Зауважимо, що обидві частини рівності є добутком поліномів від похідних  $x_t^a$ . Розглянемо один з множників, а саме  $\hat{D}_t T = T_t + x_t^c T_c$ . Оскільки ліва частина (5) ділиться на цей многочлен, то й права частина також ділиться на нього. Покажемо, що  $\hat{D}_t T$  ділить  $\hat{D}_t^2 T$ , а відповідна частка є поліномом степеня не вище першого від  $x_t^a$ . Якщо  $T_c = 0$  для всіх значень  $c$ , то  $\hat{D}_t T$  — поліном нульового степеня відносно  $x_t^a$ , а такий поліном ділить обидва множники правої частини (5). Нехай  $T_c \neq 0$  для деякого значення  $c$ . Тоді  $\hat{D}_t T$  є поліномом першого степеня від  $x_t^a$ , а тому ділить один з множників у правій частині рівняння (5). Припустимо, що  $\hat{D}_t T$  ділить  $\hat{D}_t X^i$  для деякого  $i$ . Тоді відповідна частка  $\lambda^i(t, \mathbf{x})$  не залежить від похідних  $x_t^a$ , тобто  $\hat{D}_t X^i / \hat{D}_t T = \lambda^i(t, \mathbf{x})$  або  $\hat{D}_t X^i = \lambda^i(t, \mathbf{x}) \hat{D}_t T$ . Зібравши коефіцієнти при похідних  $x_t^a$  в останній рівності, маємо

$$X_t^i = \lambda^i(t, \mathbf{x}) T_t, \quad X_a^i = \lambda^i(t, \mathbf{x}) T_a.$$

Звідси випливає, що деякі рядки якобіана  $J$  пропорційні, тобто  $J = 0$ , а це неможливо. Отже,  $\hat{D}_t T$  ділить  $\hat{D}_t^2 T$ , при цьому  $\hat{D}_t^2 X^i$  ділиться на  $\hat{D}_t X^i$ , і відношення цих поліномів не залежить від значення індексу  $i$ , тобто існують функції  $\lambda^\mu = \lambda^\mu(t, \mathbf{x})$  такі, що

$$\frac{\hat{D}_t^2 T}{\hat{D}_t T} = \frac{\hat{D}_t^2 X^i}{\hat{D}_t X^i} = \lambda^0 + x_t^a \lambda^a$$

для кожного фіксованого значення  $i$ . Перепишемо цю рівність у вигляді системи

$$\widehat{D}_t^2 T = (\lambda^0 + x_t^a \lambda^a) \widehat{D}_t T, \widehat{D}_t^2 X^i = (\lambda^0 + x_t^a \lambda^a) \widehat{D}_t X^i.$$

Зручно позначити  $t = x^0$ ,  $T = X^0$ . Тоді останню систему можна зобразити у більш компактному вигляді

$$x_t^\nu x_t^\sigma X_{\nu\sigma}^\mu = x_t^\nu \lambda^\nu X_\sigma^\mu x_t^\sigma.$$

Зауважимо, що хоча  $x_t^0 = 1$ , однак при розщепленні за похідними  $x_t^a$  можна і зручно вважати, що похідна  $x_t^0$  також варіюється. Розщеплення дає систему

$$X_{\nu\sigma}^\mu = \frac{1}{2}(\lambda^\nu X_\sigma^\mu + \lambda^\sigma X_\nu^\mu). \quad (6)$$

Розглянемо два рівняння із системи для фіксованих значень трійки індексів  $(\mu, \nu, \sigma)$ , а саме рівняння вигляду (6) та рівняння

$$X_{\nu\sigma'}^\mu = \frac{1}{2}(\lambda^\nu X_{\sigma'}^\mu + \lambda^{\sigma'} X_\nu^\mu). \quad (7)$$

Виконаємо перехресне диференціювання, тобто продиференціюємо рівняння (6) за змінною  $x^{\sigma'}$ , а рівняння (7) — за змінною  $x^\sigma$ . У результаті отримаємо рівняння

$$X_{\nu\sigma\sigma'}^\mu = \frac{1}{2}(\lambda_{\sigma'}^\nu X_\sigma^\mu + \lambda^\nu X_{\sigma\sigma'}^\mu + \lambda_{\sigma'}^\sigma X_\nu^\mu + \lambda^\sigma X_{\nu\sigma'}^\mu),$$

$$X_{\nu\sigma'\sigma}^\mu = \frac{1}{2}(\lambda_\sigma^\nu X_{\sigma'}^\mu + \lambda^\nu X_{\sigma'\sigma}^\mu + \lambda_\sigma^{\sigma'} X_\nu^\mu + \lambda^{\sigma'} X_{\nu\sigma}^\mu),$$

ліві частини яких рівні. Віднявши одне рівняння від іншого та підставивши замість других похідних функцій  $X^\mu$  відповідні вирази з (6) та (7), отримаємо рівність

$$(\lambda_{\sigma'}^\sigma - \lambda_\sigma^{\sigma'}) X_\nu^\mu - \left( \lambda_\sigma^\nu - \frac{1}{2} \lambda^\nu \lambda^\sigma \right) X_{\sigma'}^\mu + \left( \lambda_{\sigma'}^\nu - \frac{1}{2} \lambda^\nu \lambda^{\sigma'} \right) X_\sigma^\mu = 0. \quad (8)$$

Зафіксуємо попарно різні значення індексів  $\nu$ ,  $\sigma$  і  $\sigma'$ . Виберемо трійку  $(\mu_1, \mu_2, \mu_3)$  так, що

$$\left| \frac{\partial(X^{\mu_1}, X^{\mu_2}, X^{\mu_3})}{\partial(x^\nu, x^\sigma, x^{\sigma'})} \right| \neq 0.$$

Розглянемо підсистему (8) з відповідними індексами як систему алгебраїчних рівнянь на коефіцієнти при похідних функцій  $X^\mu$ . Внаслідок своєї невивроженості вона має тільки нульовий розв'язок, тобто

$$\lambda_{\sigma'}^\sigma = \lambda_\sigma^{\sigma'}, \quad \lambda_\sigma^\nu = \frac{1}{2} \lambda^\nu \lambda^\sigma.$$

З рівнянь  $\lambda_{\sigma'}^\sigma = \lambda_\sigma^{\sigma'}$  випливає, що локально існує така функція  $\Phi = \Phi(t, \mathbf{x})$ , що  $\lambda^\sigma = \Phi_\sigma$ . Далі розглянемо рівність (8) при  $\nu = \sigma$ :

$$(\lambda_{\sigma'}^\sigma - \lambda_\sigma^{\sigma'}) X_\sigma^\mu - \left( \lambda_\sigma^\nu - \frac{1}{2} (\lambda^\nu)^2 \right) X_{\sigma'}^\mu + \left( \lambda_{\sigma'}^\nu - \frac{1}{2} \lambda^\nu \lambda^{\sigma'} \right) X_\nu^\mu = 0.$$

Виберемо пару індексів  $(\mu_1, \mu_2)$  таку, що

$$\left| \frac{\partial(X^{\mu_1}, X^{\mu_2})}{\partial(x^\nu, x^{\sigma'})} \right| \neq 0.$$

Тоді, аналогічно до попереднього випадку, отримаємо  $\lambda_\nu^\nu = (\lambda^\nu)^2/2$ . Беручи до уваги цю рівність, можна стверджувати, що рівняння  $\lambda_\sigma^\nu = \lambda^\nu \lambda^\sigma/2$  виконуються для будь-яких значень індексів  $\nu$  та  $\sigma$ , у тому числі і рівних. Перепишемо рівняння  $\lambda_\sigma^\nu = \lambda^\nu \lambda^\sigma/2$  та систему (6) у термінах функції  $\Phi$ :

$$\Phi_{\nu\sigma} - \frac{1}{2}\Phi_\nu\Phi_\sigma = 0, \quad X_{\nu\sigma}^\mu - \frac{1}{2}(\Phi_\nu X_\sigma^\mu + \Phi_\sigma X_\nu^\mu) = 0.$$

Домножимо кожне з цих рівнянь на  $e^{-\Phi/2}$  і згорнемо їх праві частини в окремі похідні:  $(e^{-\Phi/2})_{\nu\sigma} = 0$ ,  $(e^{-\Phi/2}X^\mu)_{\nu\sigma} = 0$ . Оскільки ці рівності виконуються для будь-яких значень індексів  $\nu$  і  $\sigma$ , то

$$e^{-\frac{1}{2}\Phi} = \beta_0 x^0 + \beta_1 x^1 + \dots + \beta_n x^n + \beta_{n+1},$$

$$e^{-\frac{1}{2}\Phi} X^\mu = \alpha_{\mu,0} x^0 + \alpha_{\mu,1} x^1 + \dots + \alpha_{\mu,n} x^n + \alpha_{\mu,n+1},$$

де  $(\alpha_{\mu,0}, \dots, \alpha_{\mu,n+1})$ ,  $(\beta_0, \dots, \beta_{n+1})$  – набори сталих, що утворюють невироджену  $(n+2) \times (n+2)$  матрицю. Отже,

$$X^\mu = \frac{\alpha_{\mu,0} x^0 + \alpha_{\mu,1} x^1 + \dots + \alpha_{\mu,n} x^n + \alpha_{\mu,n+1}}{\beta_0 x^0 + \beta_1 x^1 + \dots + \beta_n x^n + \beta_{n+1}},$$

тобто  $X^\mu$  є дробово-лінійними функціями від змінних  $x^\nu$  та збігаються з правими частинами (3).

Таким чином, теорему доведено.

Застосований метод доведення можна поширити на довільні системи лінійних ЗДР другого порядку. Він також буде корисним при обчисленні групоїда еквівалентності класу таких систем з довільною фіксованою кількістю залежних змінних. Було б також цікаво довести теорему цієї роботи в рамках алгебраїчного підходу [7–10].

*Автор висловлює щире подяку Р. О. Поповичу та В. М. Бойко за постановку задачі, постійну увагу та допомогу в роботі.*

1. Markus L. Group theory and differential equations. – Minneapolis: Univ. of Minnesota, 1960. – 227 p.
2. González-Gascón F., González-López A. Symmetries of differential equations. IV // J. Math. Phys. – 1983. – **24**. – P. 2006–2021.
3. González-López A. Symmetries of linear systems of second-order ordinary differential equations // Ibid. – 1988. – **29**. – P. 1097–1105.
4. Merker J. Characterization of the Newtonian free particle system in  $m \geq 2$  dependent variables // Acta Appl. Math. – 2006. – **92**. – P. 125–207.
5. Lie S. Vorlesungen über Differentialgleichungen mit bekannten infinitesimalen Transformationen. – Leipzig: Teubner, 1891. – 568 s.
6. Boyko V. M., Popovych R. O., Shapoval N. M. Lie symmetries of systems of second-order linear ordinary differential equations with constant coefficients // J. Math. Anal. Appl. – 2013. – **397**. – P. 434–440.
7. Bihlo A., Popovych R. O. Point symmetry group of the barotropic vorticity equation // Proc. of 5th Workshop “Group Analysis of Differential Equations and Integrable Systems” (Protaras, Cyprus, June 6–10, 2010). – 2011. – P. 15–27.

8. *Hydon P. E.* How to construct the discrete symmetries of partial differential equations // Eur. J. Appl. Math. – 2000. – **11**. – P. 515–527.
9. *Bihlo A., Popovych R. O.* Lie symmetry analysis and exact solutions of the quasi-geostrophic two-layer problem // J. Math. Phys. – 2011. – **52**. – 033103, 24 p.
10. *Dos Santos Cardoso-Bihlo E., Popovych R. O.* Complete point symmetry group of vorticity equation on rotating sphere // J. Engrg. Math. – 2013. – **82**. – P. 31–38.

*Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка*

*Надійшло до редакції 09.12.2013*

**Н. Н. Шаповал**

### **Группа точечных симметрий системы свободных уравнений второго порядка**

*Доказано, что полной группой точечных симметрий системы свободных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка является общая проективная группа, действующая в пространстве независимых и зависимых переменных.*

**N. M. Shapoval**

### **The point symmetry group of a system of free second-order equations**

*It is proved that the complete point symmetry group of a system of free second-order ordinary differential equations is a projective general linear group acting in the space of independent and dependent variables.*



УДК 519.176

Є. В. Бондаренко

## Ріст графів дії скінченних автоматів

(Представлено академіком НАН України М. О. Перестюком)

*Розглядаються графи дії  $\Gamma_n(A)$  і  $\Gamma_\infty(A)$  для обмежених і поліноміальних автоматів  $A$ , які моделюють дію автоматів на словах довжиною  $n$  і нескінченних словах відповідно. Встановлено метод знаходження орбітального коефіцієнта стиску обмежених автоматів, росту діаметрів графів  $\Gamma_n(A)$  для обмежених автоматів, наведено оцінки на степінь поліноміального росту графів  $\Gamma_\infty(A)$ . Доведено, що графи  $\Gamma_\infty(A)$  для недетермінованих поліноміальних автоматів мають субекспоненційний ріст.*

1. Автомати є абстрактними математичними моделями послідовних машин. У 1960-х роках В. М. Глушков [1] започаткував дослідження автоматів з алгебраїчної точки зору, розглядаючи перетворення, визначені автоматами, і напівгрупи та групи, породжені такими перетвореннями. За минулі півстоліття були знайдені глибокі зв'язки між алгебраїчною теорією автоматів, динамічними системами, геометрією і теорією груп (див. [2, 3]). Одними з ключових комбінаторних об'єктів, асоційованих з автоматами, є графи дії автоматів, які моделюють дію автоматів на скінченних та нескінченних послідовностях і несуть важливу інформацію про геометричні і топологічні об'єкти, асоційовані з автоматами.

У даній роботі розглядаються різні асимптотичні властивості графів дії обмежених і поліноміальних автоматів. Зокрема, вказано метод знаходження експоненти росту діаметрів графів дії обмежених автоматів на скінченних словах, орбітального коефіцієнта стиску обмежених автоматів, наведено оцінки на степінь поліноміального росту орбітальних графів дії обмежених автоматів. За аналогією з означенням С. Сідкі, введено поняття недетермінованого поліноміального автомата і доведено, що графи дії таких автоматів мають субекспоненційний ріст, а проблема слів у напівгрупах, породжених цими автоматами, розв'язується за субекспоненційний час.

2. Нехай  $X$  — скінченна множина потужності  $|X| \geq 2$ , яку будемо називати *алфавітом*. Нехай  $X^*$  — множина всіх скінченних слів  $x_1x_2 \dots x_n$ ,  $x_i \in X$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , а  $X^\infty$  — множина всіх нескінченних вправо слів (послідовностей)  $x_1x_2 \dots$ ,  $x_i \in X$ .

**Автомати.** Детермінованим синхронним автоматом над алфавітом  $X$  називається набір  $A = (Q, \pi, \lambda)$  де  $Q$  — множина станів автомата;  $\pi: X \times Q \rightarrow Q$  — функція переходів;

$\lambda: X \times Q \rightarrow X$  — функція виходів. Такі автомати також називають автоматами Мілі. Автомат називається скінченним, якщо множина його станів скінченна. Скінченний автомат  $A$  можна задавати поміченим орієнтованим графом  $T_A$  (діаграма Мура або граф переходів), вершинами якого є стани автомата, а стрілками є  $q \rightarrow \pi(x, q)$  з міткою  $x|\lambda(x, q)$  для всіх  $q \in Q$  і  $x \in X$ . Такий граф містить повну інформацію про автомат, і ми будемо ототожнювати автомат з відповідним графом.

Автомат перетворює слова  $x_1x_2 \dots \in X^* \cup X^\infty$  таким чином: якщо автомат знаходиться в стані  $q_1 \in Q$ , він читає першу літеру  $x_1$ , виводить літеру  $y_1 = \lambda(x_1, q_1)$  і переходить у стан  $q_2 = \pi(x_1, q_1)$ ; залишок слова обробляється так само з нового стану  $q_2$  і т. д. Отже, кожен стан автомата визначає відображення  $A_q: X^* \rightarrow X^*$ ,  $q \in Q$ , де  $A_q(x_1x_2 \dots) = y_1y_2 \dots$  тоді і лише тоді, коли автомат містить орієнтований шлях, який починається в стані  $q$  і помічений парами  $x_1|y_1, x_2|y_2, \dots$ . Якщо кожне з відображень  $A_q$  є оборотним (автомат  $A$  є оборотним), то можна розглянути групу  $G(A) = \langle A_q: q \in Q \rangle$ , яка називається автоматною групою автомата  $A$ .

Оскільки нас буде цікавити саме дія автоматів на словах, то ми завжди припускаємо, що різні стани автомата визначають різні функції, тобто автомат є мінімізованим. Кожен скінченний автомат з  $n$  станами над алфавітом з  $t$  літер можна мінімізувати за час  $O(nm \log(n))$  (алгоритм Хопкрофта).

**Графи дії автоматів.** Нехай  $A$  — автомат над алфавітом  $X$ . Графом дії  $\Gamma_n(A) = \Gamma(A, X^n)$  автомата  $A$  на множині  $X^n$  називається граф з множиною вершин  $X^n$ , в якому два слова  $x_1x_2 \dots x_n$  та  $y_1y_2 \dots y_n$  з'єднані ребром тоді і лише тоді, коли  $y_1y_2 \dots y_n = A_q(x_1x_2 \dots x_n)$  для деякого стану  $q \in A$ , іншими словами, в графі переходів  $T_A$  існує орієнтований шлях  $e_1, e_2, \dots, e_n$ , де кожне ребро  $e_i$  помічене парою  $x_i|y_i$ . Аналогічно визначаються графи  $\Gamma(A, X^*)$  і  $\Gamma(A, X^\infty)$ . Зокрема, відношення суміжності в графі  $\Gamma(A, X^\infty)$  задається автоматом  $A$ . Якщо автомат  $A$  скінченний, то граф  $\Gamma(A, X^\infty)$  є локально скінченим, тобто кожна вершина графа має скінченну кількість сусідніх вершин.

Розглядаючи асимптотичні властивості графів дії скінчених автоматів, завжди можна припускати, що функція переходів  $\pi$  є сюр'єктивною, тобто в кожен стан автомата входить деяке ребро. Якщо автомат не має цієї властивості, то можна взяти максимальний підавтомат з сюр'єктивною функцією переходів; неважко показати, що графи дії цього автомата будуть мати ті самі асимптотичні властивості, що і графи дії початкового автомата.

**Ріст графів.** Нехай  $\Gamma$  — локально скінченний зв'язний граф. Функція росту  $\gamma_v(n)$  графа  $\Gamma$  відносно його вершини  $v$  обчислює кількість вершин у замкненій кулі  $B(v, n)$  радіусом  $n$  з центром у вершині  $v$ . Для того щоб позбутися залежності від вибору початкової вершини  $v$ , вводиться відношення еквівалентності на таких функціях. Для двох функцій  $f, g: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$  кажуть, що  $f$  має ріст, не більший за  $g$ , позначається  $f \prec g$ , якщо існує константа  $C > 0$  така, що  $f(n) \leq g(Cn)$  для всіх  $n \in \mathbb{N}$ . Якщо  $f \prec g$  і  $g \prec f$ , то кажуть, що  $f$  і  $g$  є еквівалентними  $f \sim g$  і мають однаковий ріст. Для довільних двох вершин графа  $\Gamma$  відповідні функції росту є еквівалентними, і можна говорити про ріст  $\gamma_\Gamma$  графа  $\Gamma$  як про клас еквівалентності його функцій росту. Кажуть, що граф має субекспоненційний ріст, якщо  $\gamma_\Gamma \prec 2^n$  і  $\gamma_\Gamma \not\prec 2^n$ . Граф має поліноміальний ріст, якщо його функція росту обмежена зверху поліномом. Якщо ріст графа субекспоненційний, але не поліноміальний, то кажуть, що граф має проміжний ріст.

**3. Обмежені автомати.** Стан автомата називається тривіальним, позначається  $e$ , якщо він визначає тривіальне перетворення простору  $X^*$ . Скінченний оборотний автомат  $A$  називається обмеженим, якщо виконується одна з таких еквівалентних умов (див. [4]):

1) кількість нескінченних вліво (еквівалентно, вправо) орієнтованих шляхів  $\dots e_2, e_1$  в графі переходів  $T_A$ , які не проходять через тривіальний стан автомата, є скінченною;

2) кожні два цикли в графі  $T_A \setminus \{e\}$  є диз'юнктними (не мають спільних вершин) і не з'єднані орієнтованим шляхом;

3) кількість шляхів довжиною  $n$  в графі  $T_A \setminus \{e\}$  обмежена незалежно від  $n$ .

Опишемо, як знайти ріст діаметрів графів дії  $\Gamma_n(A)$  для обмежених автоматів  $A$ . Для цього розглянемо відстані між скінченим числом спеціальних вершин в  $\Gamma_n$ . Для обмеженого автомата  $A$  послідовність  $\dots x_2 x_1$ ,  $x_i \in X$ , називається посткритичною, якщо вона читається вздовж нескінченного вліво шляху в графі  $T_A \setminus \{e\}$ . Множина  $P_A$  всіх посткритичних послідовностей є скінченною і називається посткритичною множиною автомата  $A$ . Для послідовності  $w = \dots x_2 x_1$  позначимо  $w_n = x_n \dots x_2 x_1$ . Для кожної пари посткритичних послідовностей  $p, q \in P_A$ ,  $p \neq q$ , позначимо через  $d_n(p, q)$  відстань між вершинами  $p_n$  і  $q_n$  в графі дії  $\Gamma_n(A)$ . Нехай  $d_n(A)$  — це вектор з координатами  $d_n(p, q)$ .

**Теорема 1.** *Нехай  $A$  — обмежений автомат з сюр'єктивною функцією переходів. Існує скінченна множина невід'ємних цілочисельних матриць  $K$  і константи  $c_1, c_2 > 0$  такі, що для всіх достатньо великих  $n \in \mathbb{N}$  виконується*

$$c_1 \min_{M_i \in K} M_1 M_2 \dots M_n \mathbf{1} \leq d_n(A) \leq c_2 \min_{M_i \in K} M_1 M_2 \dots M_n \mathbf{1} + c_2,$$

де мінімум береться окремо по кожній координаті, і  $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)$ .

Множина  $K$  з теореми будується алгоритмічно за обмеженим автоматом. У роботі [5] доведено, що існує невід'ємна цілочисельна матриця  $M$  і константи  $c_1, c_2 > 0$  такі, що для всіх достатньо великих  $n \in \mathbb{N}$  виконується

$$c_1 M^n \mathbf{1} \leq \min_{M_i \in K} M_1 M_2 \dots M_n \mathbf{1} \leq c_2 M^n \mathbf{1}.$$

Крім того, така матриця  $M$  алгоритмічно будується за множиною  $K$ . Це дозволяє знайти асимптотичну поведінку відстані  $d_n(p, q)$  для всіх  $p, q \in P_A$ . Зокрема,  $d_n(p, q) \approx n^k \lambda^n$  для деяких  $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ , які залежать від  $p, q$ . Визначимо  $\lambda_{\min}$  і  $\lambda_{\max}$  як мінімальне і максимальне серед усіх  $\lambda > 1$ , які з'являються в асимптотичному розкладі  $d_n(p, q)$  для  $p, q \in P_A$ . Нехай  $k_{\max}$  — це максимальне  $k$  серед  $d_n(p, q) \approx n^k \lambda_{\max}^n$ .

**Теорема 2.** *Нехай  $A$  — обмежений автомат з сюр'єктивною функцією переходів, і константи  $k_{\max}, \lambda_{\max}$  визначаються за  $A$ , як показано вище. Існують константи  $c_1, c_2 > 0$  такі, що для всіх достатньо великих  $n \in \mathbb{N}$  виконується*

$$c_1 n^{k_{\max}} \lambda_{\max}^n \leq \text{diam}(\Gamma_n(A)) \leq c_2 n^{k_{\max}} \lambda_{\max}^n.$$

**Теорема 3.** *Нехай  $A$  — обмежений автомат з сюр'єктивною функцією переходів, і константа  $\lambda_{\min}$  визначається за  $A$ , як показано вище. Тоді*

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{\limsup_{x_i, y_i \in X, m \geq n} \frac{\text{dist}_{\Gamma_{m-n}}(x_{n+1} \dots x_m, y_{n+1} \dots y_m)}{\text{dist}_{\Gamma_m}(x_1 x_2 \dots x_m, y_1 y_2 \dots y_m)}} = \frac{1}{\lambda_{\min}}.$$

Величина в лівій частині рівності називається орбітальним коефіцієнтом стиску автомата.

**Наслідок 1.** *Нехай  $A$  — обмежений автомат з сюр'єктивною функцією переходів і зв'язними графами дії  $\Gamma_n(A)$ . Тоді кожна зв'язна компонента графа  $\Gamma(A, X^\infty)$  (орбітальні графи дії автомата) має поліноміальний ріст, де степінь росту лежить між  $\log |X| / \log \lambda_{\max}$  і  $\log |X| / \log \lambda_{\min}$ .*



**4. Поліноміальні автомати.** Скінченний оборотний автомат  $A$  називається поліноміальним, якщо виконується одна з таких еквівалентних умов: 1) кожен два цикли в графі  $T_A \setminus \{e\}$  є диз'юнктними; 2) кількість шляхів довжиною  $n$  в графі  $T_A \setminus \{e\}$  обмежена поліномом від  $n$ . У роботі [6] доведено, що для поліноміальних автоматів кожна зв'язна компонента графа дії  $\Gamma(A, X^\infty)$  має субекспоненційний ріст. Покажемо, як цей результат можна перенести на недетерміновані автомати.

Недетерміновані автомати відрізняються від детермінованих тим, що функції переходів і виходів визначаються неоднозначно (автомат може знаходитися в декількох станах одночасно). Формально, *недетермінованим синхронним автоматом* над алфавітом  $X$  будемо називати помічений орієнтований граф, в якому мітками стрілок є пари  $x|y$  для  $x, y \in X$ . Вершини графа називаються станами автомата. Недетермінованість такого автомата полягає в тому, що з однієї вершини може виходити кілька стрілок, помічених парами  $x|*$  з одним і тим самим  $x$ .

Для недетермінованих автоматів кожен стан  $q \in A$  визначає частково визначену багатозначну функцію  $A_q$ . Множиною допустимих значень  $\text{Dom } A_q$  є всі послідовності, що читаються вздовж орієнтованих шляхів з початком у вершині  $q$ . Образом послідовності  $x_1x_2\dots$  є всі послідовності  $y_1y_2\dots$ , для яких існує орієнтований шлях  $e_1e_2\dots$  в  $A$ , що починається у вершині  $q$ , і ребро  $e_i$ , помічене парою  $x_i|y_i$  для всіх  $i$ .

Тривіальними станами недетермінованого автомата називатимемо такі стани, які визначають тривіальну частково визначену функцію, тобто  $A_q(w) = w$  для всіх допустимих  $w$ . У детермінованих автоматів може бути не більше одного тривіального стану, який відповідає тотожному відображенню. Для недетермінованих автоматів таких станів може бути багато (вони можуть відрізнятися областями визначеності). Множину всіх тривіальних станів автомата позначаємо  $A_E$ .

Скінченний недетермінований автомат  $A$  будемо називати поліноміальним, якщо в графі  $A \setminus A_E$  різні цикли є диз'юнктними. Максимальну кількість циклів в  $A \setminus A_E$ , які з'єднані орієнтованим шляхом, називатимемо ступенем поліноміального автомата  $A$ . Ця термінологія пояснюється таким спостереженням: скінченний автомат є поліноміальним ступеня  $\leq m$  тоді і лише тоді, коли кількість орієнтованих шляхів в  $A \setminus A_E$  довжиною  $n$  обмежена поліномом від  $n$  ступеня  $m$ .

Граф дії  $\Gamma(A, X^\infty)$  визначається аналогічно: вершини  $u, v \in X^\infty$  з'єднані ребром, якщо  $u \in \text{Dom } A_q$  і  $v \in A_q(u)$  для деякого стану  $q$ , тобто пара  $u|v$  читається вздовж деякого орієнтованого шляху в автоматі  $A$ . Для поліноміальних автоматів граф дії  $\Gamma(A, X^\infty)$  є локально скінченим, і ми можемо розглянути ріст його зв'язних компонент.

**Теорема 4.** *Нехай  $A$  — поліноміальний автомат ступеня  $m$ . Тоді існує константа  $C$  така, що кожна зв'язна компонента графа дії  $\Gamma(A, X^\infty)$  має ріст, не більший за  $C^{(\log n)^{m+1}}$ .*

Крім того, оцінка є точною: для кожного  $m \in \mathbb{N}$  існує поліноміальний автомат ступеня  $m$  і константа  $D > 0$  такі, що кожна зв'язна компонента графа  $\Gamma(A, X^\infty)$  має ріст, не менший за  $D^{(\log n)^{m+1}}$ . Таким чином можна будувати графи дії скінчених автоматів з проміжним ростом.

**Теорема 5.** *Зафіксуємо скінченний алфавіт  $X$  і кількість станів  $m$ . Існує алгоритм, який за субекспоненційний час від  $n$  перевіряє для даного поліноміального автомата  $A$  над алфавітом  $X$  із  $m$  станами та набору його станів  $q_1, q_2, \dots, q_n \in A$ , чи являє собою добуток  $A_{q_1}A_{q_2}\dots A_{q_n}$  тривіальну частково визначену функцію.*



Зокрема, проблема слів у напівгрупах, породжених станами поліноміальних автоматів, розв'язується за субекспоненційний час.

1. Глушков В. М. Абстрактная теория автоматов // Усп. мат. наук. – 1961. – **16**, № 5. – С. 3–62.
2. Григорчук Р. И., Некрасевич В. В., Суцанский В. И. Автоматы, динамические системы и группы // Тр. Мат. ин-та им. В. А. Стеклова. – 2000. – **231**. – С. 134–214.
3. Nekrashevych V. Self-similar groups. – Providence, RI: AMS, 2005. – 231 p.
4. Sidki S. Automorphisms of one-rooted trees: growth, circuit structure, and acyclicity // J. Math. Sci. (New York). – 2000. – **100**, No 1. – P. 1925. – 1943.
5. Bondarenko I. Dynamics of piecewise linear maps and sets of nonnegative matrices // Linear Algebra Appl. – 2009. – **431**, No 5–7. – P. 495–510.
6. Bondarenko I. Growth of Schreier graphs of automaton groups // Math. Ann. – 2012. – **354**, No 2. – P. 765–785.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 21.10.2013

**Е. В. Бондаренко**

### **Рост графов действия конечных автоматов**

*Рассматриваются графы действия  $\Gamma_n(A)$  и  $\Gamma_\infty(A)$  для ограниченных и полиномиальных автоматов  $A$ , которые моделируют действие автоматов на словах длины  $n$  и бесконечных словах соответственно. Установлен метод нахождения орбитального коэффициента стягивания ограниченных автоматов, роста диаметров графов  $\Gamma_n(A)$  для ограниченных автоматов, приведены оценки на степень полиномиального роста графов  $\Gamma_\infty(A)$ . Доказано, что графы  $\Gamma_\infty(A)$  для недетерминированных полиномиальных автоматов имеют субэкспоненциальный рост.*

**I. V. Bondarenko**

### **Growth of action graphs of finite automata**

*We consider the action graphs  $\Gamma_n(A)$  and  $\Gamma_\infty(A)$  for bounded and polynomial automata  $A$ , which model the action of automata on words of length  $n$  and infinite words, respectively. A method for finding the orbital contracting coefficient and the growth of the diameters of graphs  $\Gamma_n(A)$  for a bounded automaton is established. We give estimates on the growth degrees of the graphs  $\Gamma_\infty(A)$  for bounded automata. It is proved that the graphs  $\Gamma_\infty(A)$  for non-deterministic polynomial automata have subexponential growth.*

Т. Т. Лебедева, Н. В. Семенова, Т. И. Сергиенко

## Возмущенные упорядочивающие конусы для анализа задач векторной оптимизации в условиях неопределенности

(Представлено академиком НАН Украины В. С. Дейнекой)

*Проведен анализ свойств возмущенных конусов, частично упорядочивающих множество допустимых решений задачи векторной оптимизации относительно линейных целевых функций. Изучена структура всей совокупности специальным образом возмущенных упорядочивающих конусов, соответствующих различным значениям параметра возмущений входных данных задачи.*

Работа посвящена исследованию влияния неопределенности в исходных данных на решение задачи оптимизации со многими линейными критериями. Существуют разные источники неопределенности и среди них — изменение данных во времени, неточные входные данные, субъективные данные, неполные данные, ошибки измерения. В задачах оптимизации малые ошибки во входных данных могут привести к решениям, которые сильно отличаются от истинных. Особенно это касается задач, в которых присутствуют переменные, принимающие дискретные значения, и которые обычно не обладают свойствами дифференцируемости. Такие задачи даже при незначительных изменениях в исходных данных часто ведут себя непредсказуемо. В связи с этим актуальной является разработка инструментария для определения влияния возмущений в исходных данных на получаемое решение.

Проведенные нами исследования направлены на расширение возможностей использования конусов, которые упорядочивают множества допустимых решений задач векторной оптимизации относительно функций, составляющих векторный критерий, для анализа влияния возмущений в исходных данных на решения таких задач.

Рассмотрим задачу векторной оптимизации

$$Z(M(C, X)): \max\{Cx \mid x \in X\}, \quad (1)$$

которая состоит в поиске элементов некоторого множества оптимальных решений  $M(C, X) \in \mathfrak{M}(C, X) = \{Sl(C, X), P(C, X), Sm(C, X)\}$ , где  $P(C, X)$  — множество Парето-оптимальных (эффективных) решений задачи;  $Sl(C, X)$  — множество оптимальных по Слейтеру (слабо эффективных) решений;  $Sm(C, X)$  — множество оптимальных по Смейлу (строго эффективных) решений [1, 2];  $M(C, X) = \{x \in X \mid \omega(x, M(C, X)) = \emptyset\}$ ,  $\omega(x, P(C, X)) = \{z \in X \mid Cz \geq Cx, Cz \neq Cx\}$ ,  $\omega(x, Sl(C, X)) = \{z \in X \mid Cz > Cx\}$ ,  $\omega(x, Sm(C, X)) = \{z \in X \mid z \neq x, Cz \geq Cx\}$ ,  $C = [c_{ij}] \in \mathbb{R}^{\ell \times n}$  — матрица, строки  $c_i = (c_{i1}, \dots, c_{in})$ ,  $i \in \{1, \dots, \ell\}$  которой представляют собой наборы коэффициентов линейных целевых функций  $\langle c_i, x \rangle$ , составляющих векторный критерий задачи (1);  $X \subset \mathbb{R}^n$  — допустимое множество произвольной структуры.

Основное различие между скалярной и векторной оптимизацией состоит в упорядочивании множества допустимых решений задачи. В оптимизации с одной целевой функцией

возможно полное упорядочение допустимой области задачи относительно целевой функции. В векторной оптимизации с двумя или более целевыми функциями допустимое множество может быть лишь частично упорядочено. Частичный порядок допустимой области относительно целей оптимизации можно описать с использованием понятия конуса. Согласно [3], подмножество  $K$  из  $\mathbb{R}^n$  является конусом, если  $\lambda x \in K$  для всех  $x \in K$  и  $\lambda > 0$ . С математической точки зрения, вектор  $x \in \mathbb{R}^n$  лучше, чем вектор  $y \in \mathbb{R}^n$ , тогда и только тогда, когда  $x - y \in K$ , где  $K$  — так называемый упорядочивающий конус. Для упорядочивания допустимой области задачи (1) рассмотрим многогранный конус

$$K = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Cx \geq 0\},$$

который может быть представлен как объединение множеств

$$K = K_0 \cup K_1 \cup K_2,$$

где  $K_0 = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Cx = 0\}$ ,  $K_1 = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Cx > 0\}$ ,  $K_2 = K \setminus (K_0 \cup K_1)$ . Тогда  $\forall x \in X: x \in P(C, X) \Leftrightarrow (x + K_1 \cup K_2) \cap X = \emptyset$ ,  $x \in Sl(C, X) \Leftrightarrow (x + K_1) \cap X = \emptyset$ ,  $x \in Sm(C, X) \Leftrightarrow (x + K) \cap X \setminus \{x\} = \emptyset$ .

Очевидно, что для любых двух точек  $x \in X$  и  $x' = x + s$ , где  $s \in K$ , выполняется неравенство  $Cx' \geq Cx$ . Поэтому любой элемент  $s \in K$  назовем перспективным направлением в пространстве решений задачи (1). Если  $s \in K_0$ , то  $Cx' = Cx$ , и в этом случае  $s$  можно назвать направлением равновесия.

Определим двойственный конус  $K^*$  к многогранному конусу  $K$  с помощью формулы [4]

$$K^* = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = \sum_{k=1}^{\ell} \lambda_k c_k, \lambda_k \geq 0, k = 1, \dots, \ell\}.$$

Рассмотрим семейство специальным образом возмущенных задач  $\{Z(M(C^\tau, X)) \mid \tau \in \mathbb{R}^1\}$ , где  $M(C^\tau, X) \in \mathfrak{M}(C^\tau, X)$ , которые базируются на задаче (1) и в которых каждая строка  $c_i^\tau$ ,  $i \in \{1, \dots, \ell\}$ , возмущенной матрицы  $C^\tau$  имеет вид

$$c_i^\tau = c_i - \tau u, \tag{2}$$

где  $\tau \in \mathbb{R}^1$  — параметр возмущений;  $u \in riK^*$  — вектор возмущений,  $u \neq 0$ ,

$$u = \sum_{i=1}^{\ell} \mu_i c_i, \quad \sum_{i=1}^{\ell} \mu_i = 1, \quad \mu_i > 0, \quad i = 1, \dots, \ell. \tag{3}$$

Возмущенной задаче  $Z(M(C^\tau, X))$ , где  $M(C^\tau, X) \in \mathfrak{M}(C^\tau, X)$ ,  $\tau \in \mathbb{R}^1$ , поставим в соответствие возмущенный упорядочивающий конус  $K^\tau = \{x \in \mathbb{R}^n \mid C^\tau x \geq 0\}$ , который может быть представлен как объединение множеств

$$K^\tau = K_0^\tau \cup K_1^\tau \cup K_2^\tau,$$

где  $K_0^\tau = \{x \in \mathbb{R}^n \mid C^\tau x = 0\}$ ,  $K_1^\tau = \{x \in \mathbb{R}^n \mid C^\tau x > 0\}$ ,  $K_2^\tau = K^\tau \setminus (K_0^\tau \cup K_1^\tau)$ . Очевидно, что  $K^0 = K$ ,  $K_0^0 = K_0$ ,  $K_1^0 = K_1$ ,  $K_2^0 = K_2$ .

В данной работе продолжены описанные в [5–10] исследования свойств упорядочивающих конусов, возмущенных в соответствии с формулами (2) и (3). Некоторые из этих свойств

позволили разработать такой подход [6, 8] к регуляризации возможно неустойчивой задачи вида (1) с целочисленными переменными, который изменяет частичный порядок в пространстве решений таким образом, что оптимальные по Слейтеру решения возмущенной задачи (с немного расширенным упорядочивающим конусом, содержащим в себе исходный конус), становятся Парето-оптимальными решениями исходной задачи даже при возможных достаточно малых ошибках в исходных данных, используемых для описания векторного критерия.

Сформулируем ряд теорем, которые характеризуют закономерности изменения свойств возмущенных конусов перспективных направлений задачи (1) и их подмножеств при изменении значений параметра возмущений  $\tau$  и могут использоваться при разработке теории корректности оптимизационных многокритериальных задач, в том числе задач полностью и частично целочисленной оптимизации.

Прежде всего отметим, что значение параметра возмущений  $\tau = 1$  можно рассматривать как некий порог, при котором вектор возмущений  $u \in K^*$ , определенный по формуле (3), существенно изменяет свойства возмущенных упорядочивающих конусов, меняя в связи с этим также особенности соответствующих возмущенных задач.

**Теорема 1** [10]. Если  $\tau < 1$ , то  $K^\tau \subset \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \geq 0\}$ . Если  $\tau > 1$ , то  $K^\tau \subset \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \leq 0\}$ .

На основании этого утверждения доказана следующая теорема, описывающая в главных чертах свойство монотонности, присущее рассматриваемым здесь специальным возмущениям упорядочивающих конусов и состоящее в постепенном изменении “размеров” возмущенных конусов.

**Теорема 2** [10].  $\forall \tau', \tau'' (1 < \tau' < \tau'') : K^{\tau'} \subset K^{\tau''}$ ;  $\forall \tau', \tau'' (\tau' < \tau'' < 1) : K^{\tau''} \subset K^{\tau'}$ .

При доказательстве описанных ниже результатов исследования множеств  $\{K^\tau \mid \tau \in \mathbb{R}^1\}$ ,  $\{K_0^\tau \mid \tau \in \mathbb{R}^1\}$ ,  $\{K_1^\tau \mid \tau \in \mathbb{R}^1\}$ ,  $\{K_2^\tau \mid \tau \in \mathbb{R}^1\}$  использовалась лемма о том, что множество всех направлений равновесия исходной задачи  $Z(M(C, X))$  лежит на гиперплоскости  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\}$ , отделяющей друг от друга две совокупности возмущенных конусов:  $\{K^\tau \mid \tau < 1\}$  и  $\{K^\tau \mid \tau > 1\}$ .

**Лемма.**  $K \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\} = K_0$ .

**Доказательство.** По определению многогранного конуса  $K$  для любого направления  $y \in K \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\}$  справедливы соотношения  $c_k y \geq 0$ ,  $k = 1, \dots, \ell$ , и  $uy = \sum_{k=1}^{\ell} \mu_k c_k y = 0$ , откуда с учетом неравенств  $\mu_k > 0$ ,  $k = 1, \dots, \ell$ , приходим к выводу, что  $Cy = 0$  и, следовательно,  $y \in K_0$ . С другой стороны, выбрав произвольно точку  $x \in K_0$ , приходим к равенствам  $ux = \sum_{k=1}^{\ell} \mu_k c_k x = 0$ .

**Теорема 3.**  $\forall \tau \in \mathbb{R}^1 : K^\tau \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\} \subset K_0$ .

**Доказательство.** Рассмотрим произвольную точку  $y \in K^\tau \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\}$ , где  $\tau \in \mathbb{R}^1$ . Очевидно, для точки  $y$  при любом  $k \in \{1, \dots, \ell\}$  справедливы соотношения  $0 \leq c_k^\tau y = (c_k - \tau u)y = c_k y$ , откуда следует принадлежность  $y \in K$ . Принимая во внимание лемму, уточняем, что  $y \in K_0$ .

**Теорема 4** [8].  $\forall \tau \in \mathbb{R}^1 : K_0 \subset K_0^\tau$ .

**Доказательство.** С учетом леммы для любой точки  $x \in K_0$  при произвольном значении  $\tau \in \mathbb{R}^1$  справедливы соотношения  $c_i^\tau x = c_i^x - \tau ux = 0$  ( $i = 1, \dots, \ell$ ), откуда следует, что  $x \in K_0^\tau$ .

Из теорем 3 и 4 вытекает следствие.

**Следствие 1.**  $\forall \tau \in \mathbb{R}^1: K^\tau \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\} \subset K_0^\tau$ .

Для случая, когда значение параметра возмущений  $\tau$  отличается от единицы, результаты, доказанные в теоремах 3 и 4, можно уточнить следующим образом.

**Теорема 5** [9, 10].  $\forall \tau \in \mathbb{R}^1 \setminus \{1\}: K_0 = K_0^\tau = K^\tau \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\}$ .

Таким образом, множество направлений равновесия исходной задачи не изменяется при возмущении ее исходных данных, если значения параметра возмущений отличны от единицы. Данный вывод приводит нас также к следующему утверждению, которое становится очевидным с учетом теоремы 1 и указывает на то, что за исключением направлений равновесия все остальные перспективные направления задачи  $Z(M(C^\tau, X))$ , где  $\tau \neq 1$ , лежат в одном из открытых полупространств:  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid ux > 0\}$  при  $\tau < 1$  и  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid ux < 0\}$  при  $\tau > 1$ .

**Теорема 6.**  $\forall \tau < 1: K_1^\tau \cup K_2^\tau = K^\tau \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux > 0\}$ ;  $\forall \tau > 1: K_1^\tau \cup K_2^\tau = K^\tau \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux < 0\}$ .

Опираясь на эту теорему, конкретизируем данное в теореме 2 описание свойства монотонности, присущее возмущенным конусам перспективных направлений при изменениях значений параметра возмущений  $\tau$ .

**Теорема 7.**  $\forall \tau', \tau'' (1 < \tau' < \tau''): K_1^{\tau'} \cup K_2^{\tau'} \subset K_1^{\tau''}$ .

**Доказательство.** Выберем значения  $\tau'$  и  $\tau''$  параметра возмущений  $\tau$ , которые связаны строгими неравенствами  $1 < \tau' < \tau''$ . Очевидно, для любого направления  $x \in K_1^{\tau'} \cup K_2^{\tau'}$  выполняются условия  $c_k^{\tau'} x \geq 0$ ,  $k = 1, \dots, \ell$ , а в соответствии с теоремой 6 — и неравенство  $ux < 0$ . Учитывая эти неравенства и воспользовавшись формулами

$$\begin{aligned} c_k^{\tau''} x &= (c_k - \tau''u)x = c_k x - \tau''ux + \tau'ux - \tau'ux = c_k x - \tau'ux + (\tau' - \tau'')ux = \\ &= c_k^{\tau'} x + (\tau' - \tau'')ux, \quad k = 1, \dots, \ell, \end{aligned}$$

для оценки величины  $c_k^{\tau''} x$ , приходим к выводу о справедливости строгого неравенства  $c_k^{\tau''} x > 0$  для любого  $k = 1, \dots, \ell$ , что и означает принадлежность  $x \in K_1^{\tau''}$ .

Аналогичным образом можно доказать следующую теорему.

**Теорема 8.**  $\forall \tau', \tau'' (\tau' < \tau'' < 1): K_1^{\tau''} \cup K_2^{\tau''} \subset K_1^{\tau'}$ .

Рассмотрим теперь возмущенный упорядочивающий конус задачи (1) в случае, когда значение параметра возмущений  $\tau = 1$ .

Равенство  $K_0 = K_0^\tau$ , о котором идет речь в теореме 5, не обязательно выполняется при  $\tau = 1$ , так как возможно, что  $K_0^1 \setminus K_0 \neq \emptyset$  и не все точки множества  $K_0^1$  принадлежат гиперплоскости  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\}$ ;  $K_0^1 \setminus K_0 \subset \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux > 0\} \cup \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux < 0\}$ .

В рассматриваемом случае имеет место также следующее утверждение.

**Теорема 9** [9].  $K_0^1 = K^1$ .

Кроме того, для значения  $\tau = 1$  можно усилить результат, который был представлен в теореме 3 для произвольного значения  $\tau$  из  $\mathbb{R}^1$ .

**Теорема 10.**  $K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\} = K_0$ .

**Доказательство.** Из теоремы 3 следует включение  $K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\} \subset K_0$ . Выбрав произвольную точку  $y \in K_0$ , во-первых, приходим, согласно лемме, к выводу, что  $y \in \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\}$ . Во-вторых, согласно теоремам 4 и 9, верно  $y \in K_0^1 = K^1$ . Следовательно,  $K_0 \subset K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\}$ . Доказательство завершено.

Суммируя результаты, представленные в теоремах 5 и 10, приходим к следующему утверждению.

**Теорема 11.**  $\forall \tau \in \mathbb{R}^1: K^\tau \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux = 0\} = K_0$ .

В дополнение к теоремам 7 и 8, характеризующим взаимосвязи между подмножествами возмущенных конусов перспективных направлений при значениях параметра возмущений, отличных от единицы, предлагаем еще две теоремы, в которых при изучении указанных взаимосвязей в рассмотрение вводится также значение параметра возмущений, равное единице.

**Теорема 12.**  $\forall \tau (-\infty < \tau < 1): K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux > 0\} \subset K_1^\tau$ .

**Доказательство.** Выберем произвольную точку  $y \in K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux > 0\}$ . В связи с тем, что, согласно теореме 9,  $K_0^1 = K^1$ , для любого  $k = 1, \dots, \ell$  справедливы соотношения  $0 = c_k^1 y = (c_k - u)y$  и, следовательно,  $c_k y = uy > 0$ . Выберем значение параметра возмущений  $\tau$  в интервале  $(-\infty, 1)$  и оценим  $\forall k \in \{1, \dots, \ell\}$  величину  $c_k^\tau y$ :  $c_k^\tau y = (c_k - \tau u)y = c_k y - \tau uy = uy - \tau uy = (1 - \tau)uy > 0$ . Таким образом,  $\forall \tau \in (-\infty, 1): y \in K_1^\tau$ .

Аналогичным образом можно доказать и следующую теорему.

**Теорема 13.**  $\forall \tau (1 < \tau < +\infty): K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux < 0\} \subset K_1^\tau$ .

Анализируя приведенные выше результаты, описывающие структуру всей совокупности возмущенных конусов перспективных направлений задачи (1) при значениях параметра возмущений  $\tau \in \mathbb{R}^1$ , приходим к следующим выводам, дополняющим это описание.

Из теорем 1 и 5 вытекает утверждение.

**Утверждение 1.**  $\forall \tau', \tau'' (\tau' < 1 < \tau''): K^{\tau'} \cap K^{\tau''} = K_0$ .

Из теорем 5 и 7 следует утверждение.

**Утверждение 2.**  $\forall \tau', \tau'' (1 < \tau' < \tau''): K^{\tau'} \cap K^{\tau''} \subset K_0 \cup K_1^{\tau''}$ .

Из теорем 5 и 8 следует утверждение.

**Утверждение 3.**  $\forall \tau', \tau'' (\tau' < \tau'' < 1): K^{\tau'} \cap K^{\tau''} \subset K_0 \cup K_1^{\tau'}$ .

**Утверждение 4.**  $\bigcap_{-\infty < \tau \leq 1} K^\tau = K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \geq 0\}$ .

**Доказательство.** С одной стороны, в соответствии с теоремой 1 имеем  $\bigcap_{-\infty < \tau < 1} K^\tau \subset \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \geq 0\}$ , откуда следует, что  $\bigcap_{-\infty < \tau \leq 1} K^\tau \subset K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \geq 0\}$ . С другой

стороны, с учетом теорем 10 и 12, имеют место включения  $K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \geq 0\} \subset K_0 \cup K_1^\tau \subset K^\tau$  для всех значений параметра  $\tau$  из интервала  $(-\infty, 1)$ . Следовательно,  $K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \geq 0\} \subset \bigcap_{-\infty < \tau \leq 1} K^\tau$ , что и завершает доказательство.

Аналогичным образом, учитывая теоремы 1, 10 и 13, можно доказать такое утверждение.

**Утверждение 5.**  $\bigcap_{1 \leq \tau < +\infty} K^\tau = K^1 \cap \{x \in \mathbb{R}^n \mid ux \leq 0\}$ .

Анализируя утверждения 4 и 5 и принимая во внимание теорему 10, легко приходим к такому выводу.

**Утверждение 6** [10].  $\bigcap_{\tau \in \mathbb{R}^1} K^\tau = K_0$ .

Таким образом, в результате проведенных исследований нам удалось существенно расширить представление о свойствах специальным образом возмущенных (в соответствии с формулами (2) и (3)) конусов, которые упорядочивают множества допустимых решений векторных оптимизационных задач вида (1) с линейными частными критериями, при всевозможных значениях числового параметра возмущений  $\tau \in \mathbb{R}^1$ .

1. Подиновский В. В., Ногин В. Д. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач. – Москва: Наука, 1982. – 256 с.



2. *Smale S.* Global analysis and economics, V. Pareto theory with constraints // *J. Math. Econ.* – 1974. – No 1. – P. 213–221.
3. *Рокафеллар Р.* Выпуклый анализ. – Москва: Мир, 1973. – 470 с.
4. *Пишеничный Б. Н., Данилин Ю. М.* Численные методы в экстремальных задачах. – Москва: Наука, 1975. – 320 с.
5. *Козерацкая Л. Н., Лебедева Т. Т., Сергиенко Т. И.* Задача частично целочисленной векторной оптимизации: вопросы устойчивости // *Кибернетика.* – 1991. – № 1. – С. 58–61.
6. *Козерацкая Л. Н., Лебедева Т. Т., Сергиенко Т. И.* О регуляризации задач целочисленной векторной оптимизации // *Кибернетика и систем. анализ.* – 1993. – № 3. – С. 172–176.
7. *Козерацкая Л. Н.* Задачи векторной оптимизации: устойчивость в пространстве решений и в пространстве альтернатив // *Там же.* – 1994. – № 6. – С. 122–133.
8. *Сергиенко И. В., Козерацкая Л. Н., Лебедева Т. Т.* Исследование устойчивости и параметрический анализ дискретных оптимизационных задач. – Киев: Наук. думка, 1995. – 170 с.
9. *Сергиенко И. В., Козерацкая Л. Н., Кононова А. А.* Устойчивость и неограниченность задач векторной оптимизации // *Кибернетика и систем. анализ.* – 1997. – № 1. – С. 3–10.
10. *Kozeratska L., Forbes J. F., Goebel R. J., Kresta J. V.* Perturbed cones for analysis of uncertain multi-criteria optimization problems // *Linear algebra and its applications.* – 2004. – **378.** – P. 203–229.

*Институт кибернетики им. В. М. Глушкова  
НАН Украины, Киев*

*Поступило в редакцию 12.12.2013*

**Т. Т. Лебедева, Н. В. Семенова, Т. І. Сергієнко**

### **Збурені впорядковуючі конуси для аналізу задач векторної оптимізації за умов невизначеності**

*Проведено аналіз властивостей збурених конусів, що частково впорядковують множину допустимих розв'язків задачі векторної оптимізації відносно лінійних цільових функцій. Вивчено структуру всієї сукупності спеціальним чином збурених упорядковуючих конусів, відповідних різним значенням параметра збурень вхідних даних задачі.*

**T. T. Lebedeva, N. V. Semenova, T. I. Sergienko**

### **Perturbed ordering cones for the analysis of vector optimization problems under uncertainty**

*The analysis of the properties of perturbed cones that partially order the set of admissible solutions of the vector optimization problem with respect to linear objective functions is carried out. The structure of the set of specifically perturbed ordering cones with different values of the parameter of perturbations of the input data is studied.*

## Некоторые равенства в табличных алгебрах

*Найдены необходимые и достаточные условия, при которых одиннадцать включений, выполняемых в табличных алгебрах, превращаются в равенства. Эти условия выражаются в терминах активных доменов таблиц и являются естественными.*

Процесс информатизации общества имеет объективный характер. Ядром для подавляющего большинства современных информационных систем являются базы данных. В настоящее время наиболее распространенными остаются реляционные базы данных, математическая модель которых была впервые предложена Э. Коддом в 1970 г. [1]. С математической точки зрения реляционная база данных является конечным множеством конечных отношений различной размерности (арности) между заранее определенными множествами элементарных данных.

Табличные алгебры, введенные В. Н. Редько и Д. Б. Буйем, построены на основе реляционных алгебр Э. Кодда и существенно их развивают. Они составляют теоретический фундамент языков запросов современных табличных баз данных. Элементы носителя табличной алгебры уточняют реляционные структуры данных, а сигнатурные операции построены на базе основных табличных манипуляций в реляционных алгебрах и SQL-подобных языках.

В работе [2] установлено значительное количество различных свойств операций табличных алгебр, большинство из которых для общего случая выполняются в виде включений. В настоящей работе приведены критерии перехода одиннадцати таких включений в равенства. Эти равенства представляют интерес для теории табличных алгебр по той причине, что только на основе равенств можно осуществлять эквивалентные преобразования выражений. Эти преобразования необходимы для решения актуальной задачи оптимизации запросов [3, 4].

**Основные определения.** Зафиксируем некоторое непустое множество атрибутов  $A = \{A_1, \dots, A_n\}$ . Произвольное конечное подмножество множества  $A$  назовем схемой, причем схема может быть пустым множеством. Строкой  $s$  схемы  $R$  называется множество пар  $s = \{(A'_1, d_1), \dots, (A'_k, d_k)\}$ , проекция которого по первой компоненте равна  $R$ , причем атрибуты  $A'_1, \dots, A'_k$  попарно различны, т. е. строка является функциональным бинарным отношением. Таблицей схемы  $R$  называется конечное множество строк схемы  $R$ . Далее в работе рассматриваем таблицы схемы  $R$  с количеством атрибутов  $k$ . На множестве всех таких таблиц введены такие операции:

1) объединение  $\bigcup_R$  двух таблиц схемы  $R$  — таблица, состоящая из тех и только тех строк, которые принадлежат хотя бы одной из исходных таблиц;

2) пересечение  $\bigcap_R$  двух таблиц схемы  $R$  — таблица, состоящая из тех и только тех строк, которые принадлежат одновременно обеим исходным таблицам;

3) разность  $T_1 - T_2$  двух таблиц схемы  $R$  — таблица, состоящая из тех и только тех строк, которые принадлежат таблице  $T_1$  и не принадлежат таблице  $T_2$ .



Для введения операции насыщения необходимо одно вспомогательное понятие. Активным доменом атрибута  $A$  относительно таблицы  $T$  называется множество  $D_{A,T} = \{d \mid \exists s \in T \wedge (A, d) \in s\}$ , состоящее, говоря содержательно, из всевозможных значений атрибута  $A$  в таблице  $T$ . Насыщением  $C(T)$  называется таблица  $\prod_{A \in R} D_{A,T}$ , где  $R$  — схема таблицы  $T$ , а  $\prod$  — оператор прямого (декартового) произведения, отвечающий индексированию  $A \mapsto D_{A,T}$ ,  $A \in R$  [5]. Активным дополнением таблицы  $T$  называется таблица  $\tilde{T} = C(T) \underset{R}{-} T$ .

Введем определение операции проекции. Проекцией по множеству атрибутов  $X \subseteq R$  называется унарная параметрическая операция  $\pi_X$ , значением которой является таблица, состоящая из ограничений по  $X$  всех строк исходной таблицы:  $\pi_X(T) = \{s \mid x \mid s \in T\}$ . Здесь ограничение понимается стандартно:  $s \mid x = s \cap X \times pr_2s$ , где  $pr_2s$  — проекция строки  $s$  по второй компоненте. Пусть  $X = \{X_1, \dots, X_p\}$ . Далее в работе через  $O = \{O_1, \dots, O_{k-p}\}$  обозначим множество атрибутов  $R - X$ , не участвующих в проекции.

Для введения операции соединения (в некоторых источниках, например в [6], эта операция называется эквисоединением) необходимо одно вспомогательное понятие. Бинарные отношения  $\rho$  и  $\tau$  называются совместными (обозначается  $\rho \approx \tau$ ), если  $\rho \mid x = \tau \mid x$ , где  $X = pr_1\rho \cap pr_1\tau$  [2]. Соединением называется бинарная операция  $\otimes$ , значением которой является таблица, состоящая из всевозможных объединений совместных строк исходных таблиц, т. е.  $T_1 \otimes T_2 = \{s_1 \cup s_2 \mid s_1 \in T_1 \wedge s_2 \in T_2 \wedge s_1 \approx s_2\}$ . Пусть  $T_1$  — таблица схемы  $R_1$ ,  $T_2$  — таблица схемы  $R_2$ . Полусоединением [7] таблицы  $T_1$  по таблице  $T_2$  называется таблица  $T_1 \triangleright T_2 = \{s_1 \in T_1 \mid \exists s_2 \in T_2 \wedge s_1 \approx s_2\}$ , состоящая, говоря содержательно, из всех строк  $T_1$ , участвующих в соединении  $T_1 \otimes T_2$ .

Кроме этих операций на множестве всех таблиц введены операции селекции, деления таблиц и переименования атрибутов; эти операции не будут использованы в настоящей работе, поэтому их определения не приводим. Табличной алгеброй называют частичную алгебру с носителем — множеством всех таблиц произвольной схемы и приведенными выше девятью операциями (насыщение и полусоединение рассматриваются как вспомогательные операции). В табличной алгебре выделяют две особые таблицы: таблицу  $T_\varepsilon = \{\varepsilon\}$ , где  $\varepsilon$  — пустая строка, при этом схема таблицы  $T_\varepsilon$  является пустым множеством, и таблицу  $T_\emptyset = \emptyset$  — пустое множество строк произвольной (в том числе и непустой) схемы.

**Основные результаты.** В работе [2] в подразделах о насыщении, активном дополнении, проекции и соединении сформулирован и доказан ряд свойств этих операций. В настоящей работе найдены необходимые и достаточные условия (в виде одиннадцати теорем), при которых включения превращаются в равенства для таблиц, не являющихся особыми; для особых таблиц эти равенства тоже выполняются, но в этом случае могут не выполняться критерии.

**Теорема 1** (дистрибутивность насыщения относительно объединения). Пусть  $T_1, T_2$  — таблицы схемы  $R$ . Равенство  $C(T_1 \cup T_2) \underset{R}{=} C(T_1) \cup C(T_2)$  выполняется тогда и только тогда, когда выполняется хотя бы одно из двух условий:

а) существует не более одного атрибута, для которого активные домены относительно таблиц  $T_1$  и  $T_2$  различаются;

б) активный домен каждого атрибута  $A \in R$  относительно одной таблицы является подмножеством активного домена этого же атрибута относительно другой таблицы, т. е. выполняется утверждение  $\forall A (A \in R \Rightarrow (D_{A,T_1} \subseteq D_{A,T_2} \vee D_{A,T_2} \subseteq D_{A,T_1}))$ .

**Теорема 2** (дистрибутивность насыщения относительно пересечения). Пусть  $T_1, T_2$  — таблицы схемы  $R$ . При  $C(T_1) \cap_R C(T_2) \neq T_\emptyset$  равенство  $C\left(T_1 \cap_R T_2\right) = C(T_1) \cap_R C(T_2)$  выполняется тогда и только тогда, когда для каждого атрибута  $A \in R$  выполняется равенство  $D_{A, T_1 \cap_R T_2} = D_{A, T_1} \cap D_{A, T_2}$ .

**Теорема 3** (закон двойного отрицания). Равносильны утверждения:

а)  $C(\widetilde{T}) = C(T)$ ;

б)  $\widetilde{\widetilde{T}} = T$ ;

в) для каждого значения  $x$  активного домена каждого атрибута  $A_q$  существуют такие значения  $d_1, \dots, d_{q-1}, d_{q+1}, \dots, d_k$  активных доменов атрибутов  $A_1, \dots, A_{q-1}, A_{q+1}, \dots, A_k$  соответственно, что для строки  $s = \{(A_1, d_1), \dots, (A_{q-1}, d_{q-1}), (A_q, x), (A_{q+1}, d_{q+1}), \dots, (A_k, d_k)\}$  выполняется  $s \notin T$ .

**Теорема 4** (связь разности и активного дополнения). Равенство  $T_1 \cap_R \widetilde{T_2} = T_1 -_R T_2$  при  $T_1 -_R T_2 \neq T_\emptyset$  выполняется тогда и только тогда, когда для каждого атрибута  $A \in R$  выполняется включение  $D_{A, T_1} \subseteq D_{A, T_2}$ .

**Теорема 5** (первый закон де Моргана). Равенство  $\widetilde{T_1} \cap_R \widetilde{T_2} = \widetilde{(T_1 \cup_R T_2)}$  при  $(T_1 \cup_R T_2) \neq T_\emptyset$  выполняется тогда и только тогда, когда выполняется одно из четырех взаимоисключающих условий:

1)  $\forall A (A \in R \Rightarrow D_{A, T_1} = D_{A, T_2})$ ;

2)  $\forall A (A \in R \Rightarrow D_{A, T_2} \subseteq D_{A, T_1})$  и для всех индексов  $q$ , значений  $x \in D_{A_q, T_1} - D_{A_q, T_2}$  и всех значений  $d_1, \dots, d_{q-1}, d_{q+1}, \dots, d_k$ , принадлежащих соответственно активным доменам  $D_{A_1, T_1}, \dots, D_{A_{q-1}, T_1}, D_{A_{q+1}, T_1}, \dots, D_{A_k, T_1}$ , строка  $\{(A_1, d_1), \dots, (A_{q-1}, d_{q-1}), (A_q, x), (A_{q+1}, d_{q+1}), \dots, (A_k, d_k)\} \in T_1$ ;

3)  $\forall A (A \in R \Rightarrow D_{A, T_1} \subseteq D_{A, T_2})$  и для всех индексов  $q$ , значений  $x \in D_{A_q, T_2} - D_{A_q, T_1}$  и всех значений  $d_1, \dots, d_{q-1}, d_{q+1}, \dots, d_k$ , принадлежащих соответственно активным доменам  $D_{A_1, T_2}, \dots, D_{A_{q-1}, T_2}, D_{A_{q+1}, T_2}, \dots, D_{A_k, T_2}$ , строка  $\{(A_1, d_1), \dots, (A_{q-1}, d_{q-1}), (A_q, x), (A_{q+1}, d_{q+1}), \dots, (A_k, d_k)\} \in T_2$ ;

4) существует такой атрибут  $A_q$ , для которого существуют значения  $x \in D_{A_q, T_1} - D_{A_q, T_2}$ ,  $y \in D_{A_q, T_2} - D_{A_q, T_1}$ , причем  $D_{A_q, T_1} \cap D_{A_q, T_2} \neq \emptyset$ ; кроме того, для всех  $i \neq q$  выполняются равенства  $D_{A_i, T_1} = D_{A_i, T_2}$ ; наконец, для всех  $z_1 \in D_{A_q, T_1} - D_{A_q, T_2}$ , всех  $z_2 \in D_{A_q, T_2} - D_{A_q, T_1}$  и всех  $d_1, \dots, d_{q-1}, d_{q+1}, \dots, d_k$ , принадлежащих соответственно активным доменам  $D_{A_1, T_1}, \dots, D_{A_{q-1}, T_1}, D_{A_{q+1}, T_1}, \dots, D_{A_k, T_1}$ , строка  $\{(A_1, d_1), \dots, (A_{q-1}, d_{q-1}), (A_q, z_1), (A_{q+1}, d_{q+1}), \dots, (A_k, d_k)\} \in T_1$ , а строка  $\{(A_1, d_1), \dots, (A_{q-1}, d_{q-1}), (A_q, z_2), (A_{q+1}, d_{q+1}), \dots, (A_k, d_k)\} \in T_2$ .

**Теорема 6** (второй закон де Моргана). Равенство  $\widetilde{(T_1 \cap_R T_2)} = \widetilde{T_1} \cup_R \widetilde{T_2}$  при  $(T_1 \cap_R T_2) \neq T_\emptyset$  выполняется тогда и только тогда, когда выполняется одно из двух взаимоисключающих условий:

1) для каждого атрибута  $A \in R$  выполняются равенства  $D_{A, T_1} = D_{A, T_1 \cap_R T_2}$  и  $D_{A, T_2} = D_{A, T_1 \cap_R T_2}$ ;

2) для каждого атрибута  $A_q \in R$  и каждого такого значения  $x$ , что  $x \in D_{A_q, T_1} - D_{A_q, T_1 \cap_R T_2}$  и всех значений  $d_1, \dots, d_{q-1}, d_{q+1}, \dots, d_k$ , которые принадлежат соответ-

венно активным доменам  $D_{A_1, T_1}, \dots, D_{A_{q-1}, T_1}, D_{A_{q+1}, T_1}, \dots, D_{A_k, T_1}$ , строка  $\{(A_1, d_1), \dots, (A_{q-1}, d_{q-1}), (A_q, x), (A_{q+1}, d_{q+1}), \dots, (A_k, d_k)\} \in T_1$ . Для каждого атрибута  $A_w \in R$  и каждого такого значения  $y$ , что  $y \in D_{A_w, T_2} - D_{A_w, T_1 \cap_R T_2}$  и всех значений  $d_1, \dots, d_{w-1}, d_{w+1}, \dots, d_k$ , которые принадлежат соответственно активным доменам  $D_{A_1, T_2}, \dots, D_{A_{w-1}, T_2}, D_{A_{w+1}, T_2}, \dots, D_{A_k, T_2}$ , строка  $\{(A_1, d_1), \dots, (A_{w-1}, d_{w-1}), (A_w, y), (A_{w+1}, d_{w+1}), \dots, (A_k, d_k)\} \in T_2$ .

**Теорема 7** (о перестановочности проекции и активного дополнения). При  $T \neq T_\emptyset$  равенство  $(\pi_X(\widetilde{T})) = \pi_X(\widetilde{T})$  выполняется тогда и только тогда, когда для каждой строки  $s = \{(X_1, x_1), \dots, (X_p, x_p)\} \in \pi_X(T)$  и любых значений  $o_1 \in D_{O_1, T}, \dots, o_{k-p} \in D_{O_{k-p}, T}$ , строка  $s' = \{(X_1, x_1), \dots, (X_p, x_p), (O_1, o_1), \dots, (O_{k-p}, o_{k-p})\} \in T$ .

**Теорема 8** (дистрибутивность проекции относительно пересечения). При  $\bigcap_i T_i \neq T_\emptyset$  равенство  $\pi_X\left(\bigcap_i T_i\right) = \bigcap_i \pi_X(T_i)$  выполняется тогда и только тогда, когда для каждой строки  $s = \{(X_1, x_1), \dots, (X_p, x_p)\} \in \bigcap_i \pi_X(T)$  существуют такие значения  $o_1 \in D_{O_1, \bigcap_i T_i}, \dots, o_{k-p} \in D_{O_{k-p}, \bigcap_i T_i}$ , что строка  $s' = \{(X_1, x_1), \dots, (X_p, x_p), (O_1, o_1), \dots, (O_{k-p}, o_{k-p})\} \in \bigcap_i T_i$ .

**Теорема 9** (дистрибутивность проекции относительно разности). При  $\pi_X(T_1 -_R T_2) \neq T_\emptyset$  равенство  $\pi_X(T_1) -_X \pi_X(T_2) = \pi_X(T_1 -_R T_2)$  выполняется тогда и только тогда, когда для каждой строки  $s = \{(X_1, x_1), \dots, (X_p, x_p)\} \in \pi_X(T_1) \cap_X \pi_X(T_2)$  и всех значений  $o_1 \in D_{O_1, T_1 \cup_R T_2}, \dots, o_{k-p} \in D_{O_{k-p}, T_1 \cup_R T_2}$ , из принадлежности  $s' = \{(X_1, x_1), \dots, (X_p, x_p), (O_1, o_1), \dots, (O_{k-p}, o_{k-p})\} \in T_1$  следует принадлежность  $s' \in T_2$ .

**Теорема 10** (дистрибутивность насыщения относительно соединения). Пусть  $R_1 = \{A_1, \dots, A_m, G_{m+1}, \dots, G_p\}$  — схема таблицы  $T_1$ ,  $R_2 = \{A_1, \dots, A_m, H_{m+1}, \dots, H_q\}$  — схема таблицы  $T_2$ ,  $R' = R_1 \cap R_2$ ,  $T'_1 = T_1 -_{R_1} T_2$  и  $T'_2 = T_2 -_{R_2} T_1$ . При  $T_1 \otimes T_2 \neq T_\emptyset$  равенство  $C(T_1 \otimes T_2) = C(T_1) \otimes C(T_2)$  выполняется тогда и только тогда, когда одновременно выполняются два условия:

- а) для всех  $i \in \{m+1, \dots, p\}$  выполняется включение  $D_{G_i, T'_1} \subseteq D_{G_i, T_1 \triangleright T_2}$ ; для всех  $i \in \{m+1, \dots, q\}$  выполняется включение  $D_{H_i, T'_2} \subseteq D_{H_i, T_2 \triangleright T_1}$ ;
- б) для всех  $i \in \{1, \dots, m\}$  выполняются следующие две импликации:  $(x \in (D_{A_i, T'_1} - D_{A_i, T_1 \triangleright T_2})) \Rightarrow x \notin D_{A_i, T_2}$  и  $(x \in (D_{A_i, T'_2} - D_{A_i, T_2 \triangleright T_1})) \Rightarrow x \notin D_{A_i, T_1}$ .

**Теорема 11** (дистрибутивность активного дополнения относительно соединения). Равенство  $\widetilde{T_1} \otimes \widetilde{T_2} = \widetilde{(T_1 \otimes T_2)}$  выполняется тогда и только тогда, когда выполняется хотя бы одно из двух условий:

- а)  $T_1 = T_2$ ;
- б)  $\widetilde{T_1} \otimes \widetilde{T_2} = T_\emptyset$  и  $\widetilde{(T_1 \otimes T_2)} = T_\emptyset$ .

Таким образом, в работе исследована взаимосвязь между операциями пересечения, объединения, разности, насыщения, активного дополнения, проекции и соединения в табличных алгебрах. Найденные необходимые и достаточные условия, при которых включения, установленные в [2], превращаются в равенства: критерии дистрибутивности насыщения относительно объединения (теорема 1), пересечения (теорема 2) и соединения (теорема 10), выполнимости аналога закона двойного отрицания (теорема 3) и законов де Моргана (тео-

ремы 5 и 6), взаимосвязи разности и активного дополнения (теорема 4), перестановочности проекции и активного дополнения (теорема 7), дистрибутивности проекции относительно пересечения (теорема 8) и разности (теорема 9) и дистрибутивности активного дополнения относительно соединения (теорема 11). Результаты работы представляют теоретический и практический интерес. На основании равенств можно вводить аналоги определяющих соотношений, являющихся эффективным средством задания и анализа различных дискретных структур, а также осуществлять эквивалентные преобразования выражений, необходимые для их оптимизации, в том числе и для оптимизации запросов в реляционных базах данных.

1. Codd E. F. A Relational model of data for large shared data banks // Communications of the ACM. – 1970. – **13**, No 6. – P. 377–387.
2. Редько В. Н., Брона Ю. И., Буй Д. Б., Поляков С. А. Реляційні бази даних: табличні алгебри та SQL-подібні мови. – Київ: ВД “Академперіодика”, 2001. – 198 с.
3. Knuth D. E. The art of computer programming. Vol. 4, Fascicle 0. Introduction to combinatorial algorithms and Boolean functions. – Upper Saddle River: Addison-Wesley Professional, 2008. – 240 p.
4. Менджович Н. А., Кузнецов С. Д. Обзор развития методов лексической оптимизации запросов // Тр. ИСП РАН. – 2012. – **23**. – С. 195–214.
5. Куратовский К. Топология. Т. 1. – Москва: Мир, 1966. – 594 с.
6. Мейер Д. Теория реляционных баз данных. – Москва: Мир, 1987. – 608 с.
7. Конноли Т., Бегг К. Базы данных. Проектирование, реализация и сопровождение. Теория и практика. – Москва: ИД “Вильямс”, 2003. – 1440 с.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Поступило в редакцію 05.12.2013

Академік НАН України **В. Н. Редько, Д. Б. Буй, О. С. Сенченко**

### Деякі рівності в табличних алгебрах

*Знайдено необхідні та достатні умови, при яких одинадцять включень, які виконуються в табличних алгебрах, перетворюються у рівності. Ці умови виражаються в термінах активних доменів таблиць та є природними.*

Academician of the NAS of Ukraine **V. N. Red'ko, D. B. Buy, A. S. Senchenko**

### Some equalities in table algebras

*The necessary and sufficient conditions, due to which eleven inclusions realized in table algebras become equalities, are found. These conditions are expressed in terms of active domains of the tables and are natural.*

П. И. Стецюк, Т. Е. Романова, Г. Шайтхауэр

## О глобальном минимуме целевой функции в задаче равновесной упаковки кругов

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Ю. Г. Стояном)

*Рассматривается задача равновесной упаковки семейства кругов в круг минимального радиуса в виде многоэкстремальной задачи нелинейного программирования. С помощью негладких штрафов задача сводится к задаче безусловной минимизации негладкой функции. Предлагается алгоритм поиска локальных экстремумов негладкой функции и алгоритм уточнения оценки снизу для значения глобального минимума целевой функции, которые базируются на использовании методов оптимизации негладких функций с применением модификации  $r$ -алгоритма Шора. Приводятся результаты тестовых экспериментов.*

Задача равновесной упаковки неодинаковых кругов в круг наименьшего радиуса возникает в задачах плотной упаковки параллельных одинаковых по высоте круговых цилиндров в цилиндрический контейнер при ограничениях на динамическое равновесие системы [1, 2]. Динамическое равновесие определяется требованием, чтобы центр тяжести системы круговых цилиндров находился в центре кругового контейнера.

Математическая модель задачи равновесной упаковки неравных кругов может быть сформулирована в виде различных многоэкстремальных задач математического программирования [3]. Одна из этих формулировок является предметом исследования данной работы. Для нее мы опишем алгоритм нахождения локальных экстремумов и алгоритм уточнения оценки снизу для значения глобального минимума целевой функции, которые базируются на использовании методов оптимизации негладких функций.

**Математическая модель.** Имеется семейство кругов  $S_i$  с радиусами  $r_i$  и весами  $w_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ . Полагаем, что центр тяжести круга  $S_i$  находится в его центре. Равновесной упаковкой семейства кругов  $S_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , в круг  $S$  назовем такую их упаковку, чтобы радиус круга  $S$  был минимальным и центр тяжести семейства кругов  $S_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , совпадал с центром круга  $S$ .

Не ограничивая общности будем считать, что центр круга  $S$  находится в начале неподвижной системы координат. Пусть  $(x_i, y_i)$  — неизвестный центр круга  $S_i$ ;  $r$  — неизвестный радиус круга  $S$ . Обозначим известные величины  $\lambda_i = w_i / \sum_{i=1}^m w_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , и очевидную нижнюю границу на искомый радиус  $r_{\text{low}} = \max_{i=1, \dots, m} r_i$ . Тогда равновесной упаковке семейства кругов  $S_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , соответствует многоэкстремальная задача нелинейного программирования

$$r^* = \min_{x, y, r} r \tag{1}$$

при ограничениях

$$x_i^2 + y_i^2 \leq (r - r_i)^2, \quad i = 1, \dots, m, \tag{2}$$

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 \geq (r_i + r_j)^2, \quad 1 \leq i < j \leq m, \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i x_i = 0, \quad \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i = 0, \quad (4)$$

$$r \geq r_{\text{low}}, \quad (5)$$

где  $x = (x_1, \dots, x_m)$ ,  $y = (y_1, \dots, y_m)$ . Здесь целевая функция (1) является линейной. Ограничения (2) гарантируют, что  $S_i \subset S$ , а ограничения (3) описывают условие  $\text{int } S_i \cap \text{int } S_j = \emptyset$ ,  $1 \leq i < j \leq m$ , где  $\text{int}(\cdot)$  означает внутренность множества  $(\cdot)$ . Ограничения (4) означают, что центр тяжести семейства кругов  $S_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , находится в центре круга  $S$ . Ограничение (5) обеспечивает то, что значение радиуса круга  $S$  не уходит к минус бесконечности, чему формально не препятствует правая часть ограничения (2).

В работе [3] приведены еще две формулировки этой задачи. Первая является задачей обратно-выпуклого программирования, а вторая — задачей минимизации функции максимума из выпуклых функций при ограничениях (3) и (4). Во второй формулировке переменная  $r$  не используется и ее оптимальное значение  $r^*$  определяется из минимального значения негладкой целевой функции. Обе формулировки свободны от ограничения (5), так как неотрицательность  $r$  учитывается за счет формулировки ограничения (2) в виде  $\sqrt{x_i^2 + y_i^2} \leq r - r_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ .

**Алгоритм поиска наилучшего решения.** С помощью негладких штрафов задача (1)–(5) сводится к задаче безусловной минимизации негладкой функции

$$\min_{r,x,y} \{f(r, x, y) = r + \Phi_P(r, x, y)\}, \quad (6)$$

где штрафная функция  $\Phi_P(r, x, y)$  имеет вид

$$\Phi_P(r, x, y) = P_1 F_1(r, x, y) + P_2 F_2(x, y) + P_3 \max\{0, -r + r_{\text{low}}\} \quad (7)$$

Здесь  $P_k$  — положительные штрафные коэффициенты,  $k = 1, 2, 3$ , а функции  $F_1(r, x, y)$  и  $F_2(x, y)$  определяются так:

$$F_1(r, x, y) = \sum_{i=1}^m \max\{0, x_i^2 + y_i^2 - (r - r_i)^2\} + \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m \max\{0, -(x_i - x_j)^2 - (y_i - y_j)^2 + (r_i + r_j)^2\}, \quad (8)$$

$$F_2(x, y) = \max\left\{0, -\sum_{i=1}^m \lambda_i x_i - \Delta x, \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i - \Delta x\right\} + \max\left\{0, -\sum_{i=1}^m \lambda_i y_i - \Delta y, \sum_{i=1}^m \lambda_i y_i - \Delta y\right\}, \quad (9)$$

где  $\Delta x$  и  $\Delta y$  — заданные допуски на отклонения координат центра тяжести семейства кругов от начала координат. Использование в (7) штрафных коэффициентов  $P_k$ ,  $k = 1, 2, 3$ , позволяет учесть точность выполнения ограничений (2)–(5). Коэффициент  $P_1$ , согласно (8),



отвечает за ограничения (2), (3), коэффициент  $P_2$ , согласно (9), — за ограничения (4), а коэффициент  $P_3$  — за ограничение (5).

Алгоритм поиска наилучшего решения задачи (1)–(5) состоит в следующем. Для заданного набора стартовых точек осуществляется поиск локальных минимумов в задаче (6) с помощью модификации  $r$ -алгоритма [4]. Наилучший из локальных минимумов функции  $f(r, x, y)$ , для которого штрафная функция  $\Phi_P(r, x, y)$  близка к нулю, принимается за решение задачи (1)–(5). Ему соответствует значение целевой функции  $r_{\text{up}}$  — наилучшее значение радиуса  $r$  круга  $S$ . Стартовые точки генерируются случайным образом в круге заданного радиуса, который последовательно уточняется по мере нахождения лучшего локального минимума. Отметим, что данный алгоритм можно использовать и в случае, когда не требуется учитывать ограничения на центр тяжести. Для этого достаточно положить равным нулю штрафной коэффициент  $P_2$ .

Программная реализация алгоритма выполнена на некоммерческом языке GNU Octave [5]. Программа либо находит один из локальных минимумов в задаче (1)–(5), либо сообщает о невозможности найти допустимую точку для системы ограничений (2)–(5). Ядром программы является octave-функция `galgb5`, которая реализует  $r$ -алгоритм с постоянной величиной коэффициента растяжения пространства и адаптивной регулировкой шага в направлении нормированного антисубградиента. Эта регулировка направлена на увеличение точности поиска минимума функции по направлению в процессе счета и при этом гарантирует, что среднее (по итерациям) число шагов не превышает двух–трех.

**Двойственная оценка  $\psi^*$ .** Эта оценка аппроксимирует снизу минимальное значение целевой функции в квадратичных невыпуклых задачах и ее значение со сколь угодно большой точностью может быть найдено с помощью методов минимизации негладких выпуклых функций [6]. Модель (1)–(5) можно преобразовать к виду квадратичной экстремальной задачи

$$f^* = (r^*)^2 = \min_{r,x,y} r^2, \quad (10)$$

при ограничениях

$$x_i^2 + y_i^2 - r^2 + 2r_i r - r_i^2 \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (11)$$

$$-x_i^2 + 2x_i x_j - x_j^2 - y_i^2 + 2y_i y_j - y_j^2 + (r_i + r_j)^2 \leq 0, \quad 1 \leq i < j \leq m, \quad (12)$$

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \lambda_i \lambda_j x_i x_j = 0, \quad \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \lambda_i \lambda_j y_i y_j = 0, \quad (13)$$

$$r^2 - (r_{\text{low}} + r_{\text{up}})r + r_{\text{low}}r_{\text{up}} \leq 0. \quad (14)$$

Здесь ограничения (11) и (12) соответствуют другой записи ограничений (2) и (3), два ограничения в (13) являются возведенными в квадрат линейными равенствами из (4). Квадратичное неравенство (14) следует из соотношения  $r_{\text{low}} \leq r \leq r_{\text{up}}$ .

Наличие квадратичного неравенства (14) обеспечивает нетривиальную, т. е. не равную  $-\infty$  двойственную оценку  $\psi^*$ , которая будет оценкой снизу для  $f^*$  в задаче (10)–(14). Более того, оно гарантирует, что оценка  $\psi^*$  будет всегда не меньше, чем квадрат  $r_{\text{low}}$ . Поэтому, если алгоритм поиска наилучшего решения позволяет уточнять величину  $r_{\text{up}}$ , то двойственная оценка  $\psi^*$  позволяет уточнять величину  $r_{\text{low}}$ . На самом деле, из свойства оценки  $\psi^* \leq f^* \leq (r^*)^2$  следует  $r^* \geq \sqrt{\psi^*} \geq r_{\text{low}}$ , откуда понятно, что если величина  $\sqrt{\psi^*}$  больше,

чем  $r_{\text{low}}$ , то она может быть использована для уточнения нижней оценки  $r_{\text{low}}$ . Это означает, что для рассматриваемого класса задач вида (1)–(5) оценка  $\psi^*$  может использоваться для доказательства того, что найден глобальный минимум.

Рассмотрим тестовый пример:  $m = 5$ ,  $r_1 = 0,1$ ,  $r_2 = 0,2$ ,  $r_3 = 0,3$ ,  $r_4 = 0,5$ ,  $r_5 = 0,8$ ,  $w_1 = 0,0785$ ,  $w_2 = 0,314$ ,  $w_3 = 0,7065$ ,  $w_4 = 1,9625$ ,  $w_5 = 5,024$ . При  $P_1 = P_2 = P_3 = 10$  и  $\Delta x = \Delta y = 0,0001$  алгоритм уже для 4-й стартовой точки находит точку локального минимума  $(r_{\text{up}}, x_{\text{up}}, y_{\text{up}})$ , где  $r_{\text{up}} = 1,316108$ ,  $x_{\text{up}} = (-0,474894, -1,115151, 0,025054, -0,615244, 0,314084)$ ;  $y_{\text{up}} = (1,119551, 0,046204, 1,015799, 0,536197, -0,372840)$ .

Значение функции цели не улучшилось для 100 сгенерированных стартовых точек. При генерации стартовых точек использовался датчик случайных чисел с равномерным распределением внутри единичного куба. В точке  $(r_{\text{up}}, x_{\text{up}}, y_{\text{up}})$  ограничения (12) выполняются с некоторым запасом до  $10^{-7}$ , а ограничения (11) нарушаются не более чем на величину  $10^{-7}$ . С учетом квадратичности этих ограничений это означает, что условие касания кругов выполнено с точностью до  $\sqrt{10^{-7}} = 0,0003$ , т. е. немного хуже, чем  $\Delta x = \Delta y = 0,0001$ .

Естественен вопрос: может ли найденный наилучший локальный минимум претендовать на то, чтобы быть глобальным минимумом? Оказывается, что может и доказать это можно с помощью двойственной оценки  $\psi^*$ . Так, например, пусть  $r_{\text{low}} = 0,8$  (максимальный из пяти радиусов) и  $r_{\text{up}} = 1,35$  (немного больше, чем 1,316108, поскольку ограничения точно не выполняются). Тогда полученная оценка  $\psi^* = 1,7309$ . Отсюда получаем, что  $r^* \geq \sqrt{\psi^*} \geq 1,3156$  и есть больше, чем  $1,3 = r_4 + r_5$  — граница снизу. Следовательно, улучшить значение целевой функции  $f^* = 1,316108$  меньше, чем на величину 0,0005, нельзя. А это и есть доказательство того, что найденный локальный минимум является глобальным с наперед заданной точностью.

В заключение отметим, что двойственную оценку  $\psi^*$  можно уточнять за счет добавления в задаче (10)–(14) функционально избыточных квадратичных ограничений [6], которые являются нетривиальными следствиями условий задачи. Так, например, подобно ограничению (14) можно построить и ограничения для некоторых переменных из  $x_i, y_i, i = 1, \dots, m$ , используя диапазоны их изменения.

*Работа поддержана совместным грантом НТЦУ и НАН Украины (проект № 5710).*

1. Коваленко А. А., Панкратов А. В., Романова Т. Е., Стецюк П. И. Упаковка круговых цилиндров в цилиндрический контейнер с учетом специальных ограничений поведения системы // Журн. обчисл. та прикл. математики. – 2013. – № 1(111). – С. 126–134.
2. Stoyan Yu., Romanova T. Mathematical models of placement optimisation: two- and three-dimensional problems and applications // Modeling and Optimization in Space Engineering / G. Fasano, J. D. Pinter, eds. – New York: Springer, 2012. – P. 363–388.
3. Ненахов Э. И., Романова Т. Е., Стецюк П. И. Равновесная упаковка кругов в круг минимального радиуса // Теорія оптимальних рішень. – Київ: Ін-т кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України, 2013. – С. 143–153.
4. Шор Н. З., Стецюк П. И. Использование модификации  $r$ -алгоритма для нахождения глобального минимума полиномиальных функций // Кибернетика и систем. анализ. – 1997. – 4. – С. 28–49.
5. Octave [Электронный ресурс]: <http://www.octave.org>.
6. Shor N. Z. Nondifferentiable optimization and polynomial problems. – Dordrecht: Kluwer, 1998. – 394 p.

*Институт кибернетики им. В. М. Глушкова  
НАН Украины, Киев*

*Поступило в редакцию 26.12.2013*

*Институт проблем машиностроения им. А. Н. Подгорного  
НАН Украины, Харьков*

*Институт вычислительной математики Дрезденского  
технического университета, Германия*



П. І. Стецюк, Т. Є. Романова, Г. Шайтхауер

### Про глобальний мінімум цільової функції в задачі рівноважної упаковки кругів

*Розглядається задача рівноважної упаковки сімейства кругів у круг мінімального радіуса у вигляді багатоекстремальної задачі нелінійного програмування. За допомогою негладких штрафів задача зводиться до задачі безумовної мінімізації негладкої функції. Пропонується алгоритм пошуку локальних екстремумів негладкої функції і алгоритм уточнення оцінки знизу для значення глобального мінімуму цільової функції, які базуються на застосуванні методів оптимізації негладких функцій із використанням модифікації r-алгоритму Шора. Наводяться результати тестових експериментів.*

P. I. Stetsyuk, T. E. Romanova, G. Schiethauer

### On the global minimum of the objective function in a balanced circular packing problem

*The paper considers the balanced packing problem of a given family of circles into a larger circle of the minimal radius as a multiextremal nonlinear programming problem. We reduce the problem to an unconstrained minimization problem of a non-smooth function by means of nonsmooth penalty functions. We propose an efficient algorithm to search for local extrema, as well as an algorithm of improvement of a lower estimate of the global minimum of the objective function. The algorithms use non-differentiable optimization methods based on Shor's r-algorithm. Computational test results are given.*



УДК 539.421

А. О. Камінський, М. Ф. Селіванов

## Злиття двох колінеарних тріщин різної довжини у в'язкопружній композитній пластині

*(Представлено академіком НАН України В. Д. Кубенком)*

*За допомогою лінійної теорії в'язкопружності побудовано визначальні рівняння для залежних від часу положень кінців різних за довжиною колінеарних тріщин нормального відриву в ортотропній композитній пластині за умов плоского напруженого стану. Визначальні рівняння являють собою систему інтегральних рівнянь та нерівностей. Числові приклади кінетичних кривих наведено для двох початкових відстаней між тріщинами. Для розглянутої задачі швидкості поширення кінців тріщини різняться.*

Вивченню поширення ізольованої тріщини внаслідок повзучості матеріалу присвячена значна кількість публікацій [1]. На практиці не менш важливим є ще один тип довготривалого руйнування, коли в процесі повільного підростання тріщин докритичної довжини відбувається їх об'єднання в єдину магістральну тріщину, яка може мати критичну довжину або продовжити докритичне поширення та злиття з іншими дрібними тріщинами. Цей тип руйнування можна віднести до багатоосередкового руйнування, проблеми якого широко обговорювалися на міжнародній конференції ICF-8 у зв'язку з руйнуванням виготовлених з полімерних композитних матеріалів елементів конструкцій літаків.

В одній з перших публікацій щодо цієї проблеми [2] досліджено злиття двох колінеарних напівнескінчених тріщин в ізотропній в'язкопружній пластині. Як висновок зазначено, що руйнування перемички може відбуватися за одним з двох механізмів: критичне злиття (розкриття у вершині тріщини (COD) близьке до свого критичного значення) та докритичне злиття, під час якого істотно зростає швидкість поширення тріщин. Кінетика злиття тріщин описана в роботі одним інтегральним рівнянням для знаходження напіввідстані між тріщинами як функції часу.

У роботі [3] постановку було ускладнено скінченністю тріщин, що зливаються; вивчалось злиття та поширення в зовнішні боки двох колінеарних тріщин однакової довжини в ізотропній пластині. Отримано такі результати: для високих рівнів зовнішнього наванта-

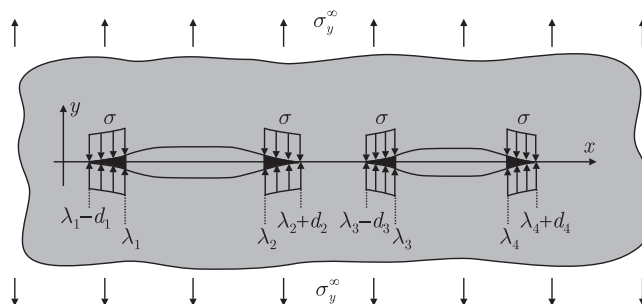


Рис. 1

ження і при малих початкових відстанях між сусідніми вершинами тріщини зливаються до початку зростання у зовнішні боки; при збільшенні початкової відстані момент часу початку поширення у зовнішні боки наближається до тривалості інкубаційного періоду, а момент часу злиття тріщин — до тривалості усього докритичного зростання (при достатньому початковому віддаленні кожна з тріщин зростатиме в обидва боки, причому момент злиття буде відповідати закінченню докритичного поширення). Положення кінців тріщин як функцій часу описано в роботі системою інтегрального рівняння та нерівності (при поширенні тільки внутрішніх кінців) та двох інтегральних рівнянь (при поширенні кожної з тріщин в обидва боки).

У даній роботі досліджується докритичне злиття та поширення системи двох колінеарних тріщин різної довжини в ортотропній в'язкопружній пластині, виготовленій з композитного матеріалу.

Кінетика злиття та поширення тріщин описана в роботі системою чотирьох інтегральних рівнянь і нерівностей для знаходження положення кінців тріщин як функцій часу; визначальні співвідношення розв'язані чисельним методом. Розраховано кінетичні криві зростання двох колінеарних тріщин у в'язкопружній пластині під дією зовнішнього навантаження, прикладеного на значній відстані від тріщин у напрямку нормалі до лінії їх розташування.

**Рівняння поширення двох колінеарних тріщин.** Знайдемо розв'язок задачі про переміщення берегів системи двох тріщин різної довжини у нескінченній лінійно пружній ортотропній пластині в рамках моделі, що включає зони переддруйнування на продовженні тріщини. Рівень зовнішнього навантаження розглядатимемо таким, що дозволяє використовувати концепцію тонкої структури [4].

Узагальнений закон Гука для головних напрямків  $x$  і  $y$  ортотропної пластини подамо у вигляді

$$\varepsilon_x = a_{11}\sigma_x + a_{12}\sigma_y; \quad \varepsilon_y = -a_{12}\sigma_x + a_{22}\sigma_y; \quad \gamma_{xy} = a_{66}\tau_{xy}, \quad (1)$$

де  $a_{ij}$  — модулі податливості матеріалу пластини ( $a_{11} = 1/E_{11}$ ,  $a_{22} = 1/E_{22}$ ,  $a_{12} = -\nu_{21}/E_{11}$ ,  $a_{16} = 1/G_{12}$ ).

Нехай у пластині вздовж прямої, що збігається з одним із головних напрямків, розташована система двох тріщин різної довжини (рис. 1). До тіла прикладено рівномірно розподілене на нескінченності розтягуюче зусилля  $\sigma_y^\infty$ , напрямком якого збігається з напрямком нормалі до лінії розташування тріщин. Введемо ортогональну декартову систему координат, вісь  $Ox$  якої направимо вздовж лінії тріщин.

Відповідно до моделі Леонова–Панасюка–Дагдейла області нелінійної поведінки матеріалу в околі вершин тріщин замінимо розрізами, до берегів яких прикладені стискаючі напруження інтенсивністю  $\sigma$ . Таким чином, приходимо до задачі теорії пружності про розтяг пружної пластинки з розрізами вздовж осі  $Ox$  при таких контурних умовах:

$$\tau_{xy}(x) = 0, \quad x \in L; \quad \sigma_y(x) = \begin{cases} 0, & x \in L', \\ \sigma, & x \in L'', \end{cases}$$

де

$$L = L' \cup L'', \quad L' = \bigcup_n (\lambda_{2n-1}, \lambda_{2n}), \quad L'' = \bigcup_{k=1}^4 L''_k, \\ L''_k = \begin{cases} [\lambda_k - d_k, \lambda_k], & k = 2n - 1, \\ [\lambda_k, \lambda_k + d_k], & k = 2n, \end{cases} \quad n = 1, 2.$$

Кінці розрізів  $\lambda_{2n-1} - d_{2n-1}$  і  $\lambda_{2n} + d_{2n}$  необхідно визначати так, щоб у відповідних точках виконувалася умова скінченності напружень.

Запишемо розв'язок цієї задачі:

$$v(x) = \Lambda \frac{\sigma d_k}{\pi} F \left[ \frac{|x - \lambda_k|}{d_k} \right], \quad x \in L''_k, \quad d_k = \frac{\pi K_I^2(\lambda_k)}{8\sigma_2}, \quad (2)$$

$$\Lambda = 2\sqrt{a_{22} \left[ 2 \left( \sqrt{a_{11}a_{22}} + a_{12} \right) + a_{66} \right]}, \quad (3)$$

$$F(s) = \sqrt{1-s} + \frac{s}{2} \ln \frac{1 - \sqrt{1-s}}{1 + \sqrt{1-s}},$$

$$K_I(\lambda_k) = \frac{\sqrt{2\pi\sigma_y^\infty \tilde{P}(\lambda_k)}}{\sqrt{R(\lambda)}}, \quad \tilde{P}(x) = x^2 + \tilde{C}_1 x + \tilde{C}_2, \quad R(\lambda) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^4 |\lambda_k - \lambda_i|,$$

$$\tilde{C}_1 = -\alpha_{-3}, \quad \tilde{C}_2 = \frac{\int_0^\infty \frac{t(\tau)[\alpha_{-3} - t(\tau)] d\tau}{X_2(\tau)}}{\int_0^\infty \frac{d\tau}{X_2(\tau)}}, \quad \alpha_{-3} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \lambda_i, \quad t(\tau) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 \tau^2}{1 + \tau^2},$$

$$X_2(\tau) = \sqrt{(\tau^2 + \xi_3)(\tau^2 + \xi_4)}, \quad \xi_k = \frac{\lambda_k - \lambda_1}{\lambda_k - \lambda_2}, \quad k = 3, 4.$$

В'язкопружне зміщення вздовж зон передруйнування визначатимемо на основі розв'язку задачі про пружне розкриття за допомогою принципу пружно-в'язкопружної аналогії, що є аналогом принципу Вольтерра, який одержав обґрунтування для аналогічних задач у роботі [1]. Згідно з цим принципом, у виразі для зміщень берегів на продовженні тріщини змінимо пружні модулі відповідними перетвореними величинами і скористаємося оберненим перетворенням.

Якщо релаксаційні властивості матеріалів компонентів композита можна описати в рамках лінійної теорії в'язкопружності, ефективні модулі подамо рядом функцій Мітгаг–Леффлера [5]:

$$e_{n,ij}(t) = e_{n,ij}^{\infty} + \sum_{k=1}^{\infty} \mu_{n,ij,k} E_{\alpha_{n,ij};1}(-\beta_{n,ij,k} t^{\alpha_{n,ij}}), \quad E_{\alpha;\delta}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{\Gamma[\alpha k + \delta]} \quad (4)$$

( $n = 1$  відповідає матеріалу армування,  $n = 2$  — наповнювача,  $e^{\infty}$  — довготривале значення модуля). При проведенні обчислень ми залишимо лише один доданок у виразі (4) і використовуватимемо один параметр  $\alpha$  функції Мітгаг–Леффлера для описання довготривалих властивостей матеріалів компонентів композита з метою якісного дослідження результатів. Вважатимемо також, що матеріали компонентів композита є ізотропними (механічні властивості описуємо модулем Юнга  $E$  і коефіцієнтом Пуассона  $\nu$ , який не залежить від часу). Відзначимо, що жодне з цих спрощень не обумовлене використанням методом розв'язання поставленої задачі.

При вказаних спрощеннях вираз (4) в області перетворення набуде вигляду

$$\tilde{E}_n(s) = E_n^{\infty} + (E_n^0 - E_n^{\infty}) \frac{s^{\alpha}}{s^{\alpha} + \beta_n},$$

де  $\tilde{E}(s) = s\bar{E}(s)$ ;  $\bar{E}(s)$  — перетворення Лапласа функції  $E(t)$ ;  $E^0$  — миттєве значення модуля.

Виходячи з виразів для перетворень в'язкопружних аналогів модулів Юнга матеріалів компонент композита, використовуючи методи механіки композитних матеріалів [6], знайдемо перетворення в'язкопружних аналогів модулів податливості пластини  $a_{ij}$  (див. (1)). Підставимо отримане у вираз (3) і знайдемо обернене перетворення. Матимемо

$$\Lambda(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\tilde{\Lambda}/s\}, \quad \Lambda'(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\tilde{\Lambda} - \tilde{\Lambda}^{\infty}\} \quad (5)$$

(більш детально про отримання величини  $\Lambda(t)$  див. [7]).

Переходимо до визначення закону зміни вертикального переміщення як функції часу. У випадку залежності від часу характеристики  $\Lambda$  і координат кінців тріщини  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)$  змінюємо величину  $v(x)$  у виразі (2) інтегралом Больцмана, а величину  $\sigma_y^{\infty}$  — функцією  $\sigma_y^{\infty}(t) = \sigma_y^{\infty} h(t)$  ( $h(t)$  — одинична функція Хевісайда). Запишемо

$$v(x, t) = \int_0^t \Lambda(t - \tau) dv[x; \lambda(\tau)],$$

$$v(x; \lambda) = \frac{\pi[\sigma_y^{\infty} \tilde{P}(\lambda_k)]^2}{4\sigma R(\lambda)}, \quad x \in L_k'' \quad (6)$$

Рівняння для визначення положення кінців тріщин при зростанні на основі критерію критичного розкриття тріщини можна записати у вигляді системи інтегральних рівнянь та нерівностей [3]

$$\begin{cases} v(\lambda_i(t), t) = v^*, \\ v(\lambda_j(t), t) < v^* \end{cases} \quad (7)$$

(індекси  $i$  відповідають вершинам, де досягнуто критичне значення вертикального переміщення  $v^*$ , а індекси  $j$  — вершинам, де критичного значення не досягнуто).

Тривалість інкубаційного періоду розвитку колінеарних тріщин  $t_0$  визначимо з рівняння

$$v(\lambda_{i1}(0), t_0) = v^*, \quad \max_k \{v[\lambda_k(0); \lambda(0)]\} = v[\lambda_{i1}(0); \lambda(0)]$$

(індекс  $i1$  відповідає вершині, в якій вертикальне переміщення найбільше для початкового положення  $\lambda(t)$ ).

Далі буде запропоновано схему чисельного розв'язання системи (7), коли тріщини починають зростати.

Шукатимемо розв'язок системи (7)  $\lambda(t)$  в моменти часу  $t_0(1+k\Delta)$ ,  $k = 1, 2, \dots$ . Рівняння в системі (7), що відповідає  $i1$ -й вершині в момент часу  $t = t_1$ , набуде вигляду

$$v[\lambda_{i1}(t_1); \lambda(t_1)] + \int_0^{t_1} \Lambda'(t_1 - \tau)v[\lambda_{i1}(t_1); \lambda(\tau)]d\tau = v^*.$$

Знайдемо розв'язок цього рівняння  $\lambda_{i1}(t_1)$ , покладаючи, що  $\lambda_{i1}(t)$  змінюється лінійно при  $t_0 \leq t \leq t_1$ . Продовжимо знаходити  $\lambda_{i1}(t_k)$ , доки критичного переміщення не буде досягнуто в іншій вершині, порядковий номер якої  $i2 \neq i1$ : для  $k = k1$  отримаємо  $v(\lambda_{i2}(t_k), t_k) > v^*$ .

Рівняння в системі (7), що відповідає  $i1$ -й і  $i2$ -й вершинам в момент часу  $t = t_{k2}$ , набуде вигляду

$$\begin{cases} v[\lambda_{i1}(t_{k1}); \lambda(t_{k1})] + \int_0^{t_{k1}} \Lambda'(t_{k1} - \tau)v[\lambda_{i1}(t_{k1}); \lambda(\tau)]d\tau = v^*, \\ v[\lambda_{i2}(t_{k1}); \lambda(t_{k1})] + \int_0^{t_{k1}} \Lambda'(t_{k1} - \tau)v[\lambda_{i2}(t_{k1}); \lambda(\tau)]d\tau = v^*. \end{cases}$$

Знайдемо розв'язок цієї системи  $(\lambda_{i1}(t_{k1}), \lambda_{i2}(t_{k1}))$ , покладаючи, що  $\lambda_{i1}(t)$  і  $\lambda_{i2}(t)$  змінюється лінійно при  $t_{k1-1} \leq t \leq t_{k1}$ . Продовжимо знаходити  $(\lambda_{i1}(t_k), \lambda_{i2}(t_k))$ , доки критичного переміщення не буде досягнуто в іншій вершині, порядковий номер якої  $i3$  ( $i3 \neq i1, i3 \neq i2$ ): для  $k = k2$  отримаємо  $v(\lambda_{i3}(t_k), t_k) > v^*$ . Подібним чином продовжуватимемо визначати  $\lambda(t)$ . При значному віддаленні тріщин рухатися почнуть всі їх кінці. У випадку, коли на якомусь кроці система (7) не має розв'язку, покладаємо, що відповідний момент часу є початком етапу динамічного поширення тріщин. Внеском цього етапу в загальну довговічність тіла з тріщинами будемо нехтувати.

**Числові приклади.** Розв'язки системи (7) отримаємо при таких параметрах задачі.

Реологічні параметри композита:

1) наповнювача —  $E_2^0 = 4000$  МПа,  $E_2^\infty = 400$  МПа,  $\alpha = 0,5$ ,  $\beta_2 = 0,1$  с $^{-\alpha}$ ;

2) волокон —  $E_1^0 = 79810$  МПа,  $E_1^\infty = 7981$  МПа,  $\beta_1 = 0,01$  с $^{-\alpha}$ ; об'ємна концентрація волокон  $c_1 = 0,2$ .

Параметри тріщиностійкості та зовнішнього навантаження:  $\sigma = 35$  МПа,  $v^* = 1,5 \cdot 10^{-5}$  м,  $\sigma/\sigma_y^\infty = 4$ .

На рис. 2 зображено кінетичні криві зростання двох колінеарних тріщин довжиною 2 і 2,5 см. Рис. 2, а відповідає випадку, коли початкова відстань між тріщинами  $\lambda_3(0) - \lambda_2(0) = 1$  см, рис. 2, б — випадку, коли  $\lambda_3(0) - \lambda_2(0) = 0,7$  см. Зрозуміло, що в обох випадках першим починає рухатися кінець більшої тріщини, який є ближчим до меншої

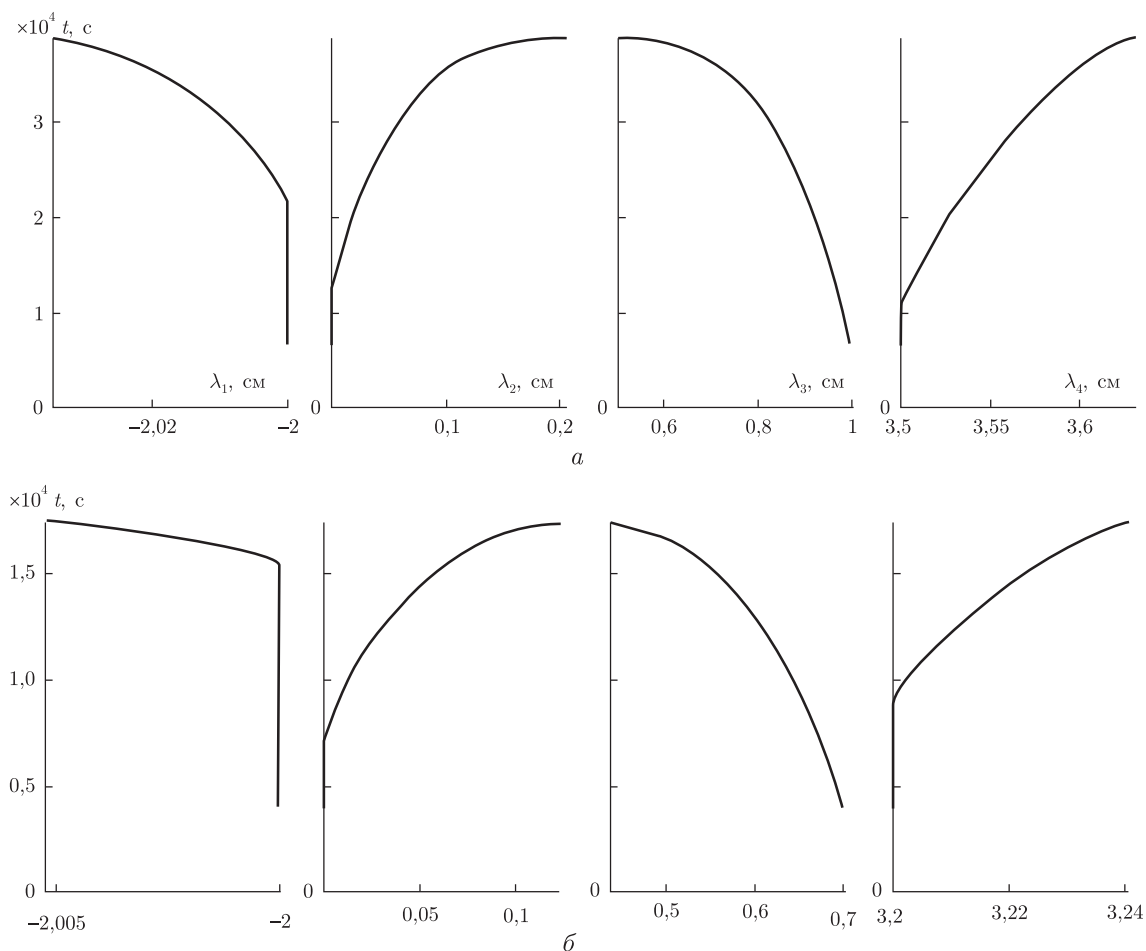


Рис. 2

тріщини ( $i1 = 3$ ). У прикладі *a* другим починає рухатися зовнішній кінець більшої тріщини ( $i2 = 4$ ), у прикладі *b* — внутрішній кінець меншої тріщини ( $i2 = 2$ ).

Таким чином, в роботі запропоновано та проілюстровано ефективний метод дослідження поширення колінеарних тріщин у в'язкопружній пластині. Метод можна перенести на дослідження зростання та злиття систем колінеарних тріщин, кількість яких перевищує дві.

1. Каминский А. А. Разрушение вязкоупругих тел с трещинами. – Киев: Наук. думка, 1990. – 310 с.
2. Gutzul V. I., Kaminsky A. A. Kinetics of fracture of a viscoelastic plate with two cracks // Int. Appl. Mech. – 1989. – **25**, No 5. – P. 477–483.
3. Kaminsky A. A., Selivanov M. F., Chornoivan Yu. O. Model of growth and coalescence of two collinear cracks in a viscoelastic body // J. of Math. Sciences. – 2013. – **190**, No 5. – P. 697–709.
4. Черепанов Г. П. Механика хрупкого разрушения. – Москва: Наука, 1974. – 640 с.
5. Selivanov M. F. On the effective properties of linear viscoelastic composite // Int. Appl. Mech. – 2009. – **45**, No 10. – P. 62–70.
6. Ван Фо Фы Г. А. Композиционные материалы волокнистого строения. – Киев: Наук. думка, 1970. – 404 с.
7. Kaminsky A. A., Selivanov M. F., Chornoivan Yu. O. On subcritical development of a shear crack in a composite with viscoelastic components // J. of Math. Sci. – 2011. – **176**, No 5. – P. 616–630.

Інститут механіки ім. С. П. Тимошенка  
НАН України, Київ

Надійшло до редакції 21.11.2013

**А. А. Каминский, М. Ф. Селиванов**

**Слияние двух коллинеарных трещин разной длины в вязкоупругой композитной пластине**

*При помощи линейной теории вязкоупругости получены определяющие уравнения для зависящих от времени координат вершин отличающихся по длине коллинеарных трещин нормального отрыва в ортотропной композитной пластине при плоском напряженном состоянии. Определяющие уравнения представляют собой систему интегральных уравнений и неравенств. Численные примеры кинетических кривых представлены для двух начальных расстояний между трещинами. Для рассмотренной задачи скорости распространения концов трещины различны.*

**A. A. Kaminsky, M. F. Selivanov**

**Coalescence of two unequal collinear cracks in a viscoelastic composite plate**

*Using the theory of linear viscoelasticity, the constitutive relations for the time-dependent tips of the mode I nonequal collinear cracks in orthotropic composite materials under conditions of a in-plane stress state are obtained. The constitutive relations are a system of integral equations and inequalities. The numerical examples of kinetic curves are presented for two initial distances between cracks. The propagation rates of crack tips are different for the problem under study.*



## Построение модели деформирования и кратковременной повреждаемости слоистого композита на основе деформационного критерия микропрочности

*Построена структурная модель связанных процессов деформирования и кратковременной повреждаемости слоистых композитов с физически нелинейными компонентами, диаграммы деформирования которых имеют ниспадающие ветви. Повреждаемость моделируется рассеянным разрушением микрообъемов компонентов и образованием на их месте стохастически расположенных квазисферических микропор. Условием кратковременного разрушения микрообъема материала принят деформационный критерий прочности относительно второго инварианта девиатора микродеформаций. Исследовано влияние объемного содержания компонентов на деформирование и повреждаемость слоистого композита.*

В основе структурных моделей связанных процессов деформирования и повреждаемости однородных и композитных материалов [1–6] лежит представление о стохастической неоднородности микропрочности материала, что ведет при нагружении к рассеянным микроразрушениям, уменьшению жесткости и несущей способности материала. Моделирование микроразрушений порами и применение моделей и методов механики стохастически неоднородных сред [7] позволяет описать связанные процессы деформирования и повреждаемости материала. Если принять силовой критерий микропрочности относительно микронапряжений [1–4, 6], то повреждаемость материала можно описать только для восходящей части нелинейной диаграммы деформирования микрообъема. При деформационном критерии микропрочности повреждаемость материала может быть описана для полной нелинейной диаграммы деформирования микрообъема, включая и ниспадающий участок. На этой основе в работе [5] исследованы связанные процессы деформирования и повреждаемости однородных материалов и стохастических композитов зернистой структуры. В настоящей работе связанные процессы деформирования и повреждаемости исследуются в слоистом композите.

**Исходные уравнения.** Рассмотрим двухкомпонентный композит слоистой структуры, упругое деформирование компонентов которого следует физически нелинейному закону и сопровождается образованием рассеянных разрушений микрообъемов, обусловленным стохастической неоднородностью микропрочности. Разрушенные микрообъемы моделируем квазисферическими порами с размерами и расстояниями между ними пренебрежимо малыми по сравнению с толщинами слоев. Обозначим объемные содержания, начальные пористости и полные пористости компонентов соответственно  $c_1, p_{10}, p_1$  и  $c_2, p_{20}, p_2$ , модули объемного сжатия и сдвига неразрушенных частей компонентов соответственно  $K_1, \mu_1$  и  $K_2, \mu_2$ , а также эффективные модули объемного сжатия и сдвига пористых компонентов соответственно  $K_1^*, \mu_1^*$  и  $K_2^*, \mu_2^*$ .

Определение напряженно-деформированного состояния и эффективных свойств слоистого материала с пористыми компонентами сводится к двум однотипным последовательным задачам — определение напряжений и деформаций неразрушенных частей компонентов  $\langle \sigma_{ij}^1 \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{ij}^1 \rangle$ ,  $\langle \sigma_{ij}^2 \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{ij}^2 \rangle$  и эффективных свойств пористых компонентов  $K_1^*$ ,  $\mu_1^*$ ,  $K_2^*$ ,  $\mu_2^*$  при заданных макродеформациях пористых компонентов  $\langle \sigma_{ij}^{*1} \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{ij}^{*1} \rangle$ ,  $\langle \sigma_{ij}^{*2} \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{ij}^{*2} \rangle$  и эффективных свойств слоистого материала  $\lambda_{11}^*$ ,  $\lambda_{12}^*$ ,  $\lambda_{13}^*$ ,  $\lambda_{33}^*$ ,  $\lambda_{44}^*$  при заданных макродеформациях композита  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ .

Каждая из указанных выше задач сводится к следующей формулировке. Рассматривается двухкомпонентный стохастический композитный материал с идеальной связью компонентов, представляющий собой микронеоднородную физически нелинейную статистически однородную упругую среду. Тогда зависимости между микронапряжениями  $\sigma_{ij}$  и микродеформациями  $\varepsilon_{ij}$  для произвольной точки можно представить в виде

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijmn}(\varepsilon_{\alpha\beta})\varepsilon_{mn}, \quad (1)$$

где тензор модулей упругости  $\lambda_{ijmn}$ , детерминировано зависящий от деформаций  $\varepsilon_{\alpha\beta}$ , является случайной статистически однородной функцией координат  $x_r$ .

Если макрообъем композита находится в условиях макрооднородного деформирования, то микронапряжения  $\sigma_{ij}$  и микродеформации  $\varepsilon_{ij}$  будут статистически однородными случайными функциями координат, удовлетворяющими свойству эргодичности. Поэтому их математические ожидания  $\langle \sigma_{ij} \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$  в произвольной точке макрообъема равны соответственно микронапряжениям и макродеформациям [7]. На основе уравнений равновесия

$$\sigma_{ij,j} = 0, \quad (2)$$

соотношений Коши

$$\varepsilon_{ij} = u_{(i,j)} \equiv \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (3)$$

и зависимостей (1) приходим к физически и статистически нелинейным уравнениям равновесия относительно перемещений  $u_i$

$$[\lambda_{ijmn}(\varepsilon_{\alpha\beta})u_{m,n}]_{,j} = 0. \quad (4)$$

Представляя случайные поля напряжений, деформаций и перемещений в виде суммы математических ожиданий и флуктуаций

$$\sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle + \sigma_{ij}^0, \quad \varepsilon_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle + \varepsilon_{ij}^0, \quad u_i = \langle u_i \rangle + u_i^0, \quad (5)$$

приведем уравнение (4) к виду

$$\lambda_{ijmn}^c u_{m,n,j}^0 + \{[\lambda_{ijmn}(\varepsilon_{\alpha\beta}) - \lambda_{ijmn}^c]\varepsilon_{mn}\}_{,j} = 0, \quad (6)$$

где  $\lambda_{ijmn}^c$  — тензор модулей упругости некоторого однородного тела сравнения. Граничное условие на бесконечно удаленной границе  $S$  области  $V$  макрообъема, согласно (5), будет следующим:

$$u_i^0|_S = 0. \quad (7)$$

С помощью функции Грина  $G_{ij}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)})$ , удовлетворяющей уравнению

$$\lambda_{ijmn}^c G_{mk,jn}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) + \delta(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) \delta_{ik} = 0, \quad (8)$$

краевая задача (6), (7) сводится к интегральному уравнению относительно деформаций

$$\varepsilon_{ij}^{(1)} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle + K_{ijpq}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) [\lambda_{pqmn}^{(2)}(\varepsilon_{\alpha\beta}^{(2)}) - \lambda_{pqmn}^c] \varepsilon_{mn}^{(2)}, \quad (9)$$

где интегральный оператор  $K_{ijpq}$  определяется правилом

$$K_{ijpq}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) \varphi^{(2)} = \int_{V^{(2)}} G_{(ip,j)q}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) (\varphi^{(2)} - \langle \varphi \rangle) dV^{(2)}, \quad (10)$$

причем индекс в круглых скобках сверху обозначает соответствующую точку пространства.

Нелинейные зависимости (1) для точки, находящейся в  $k$ -компоненте, имеют вид

$$\sigma_{ij}^k = \lambda_{ijmn}^k (\varepsilon_{\alpha\beta}^k) \varepsilon_{mn}^k, \quad (11)$$

где напряжения и деформации можно представить суммами средних и соответствующих флуктуаций по  $k$ -компоненту

$$\sigma_{ij}^k = \langle \sigma_{ij}^k \rangle + \sigma_{ij}^{k0}, \quad \varepsilon_{ij}^k = \langle \varepsilon_{ij}^k \rangle + \varepsilon_{ij}^{k0}. \quad (12)$$

Пренебрегая флуктуациями  $\sigma_{ij}^{k0}$ ,  $\varepsilon_{ij}^{k0}$ , из (11), (12) получим

$$\langle \sigma_{ij}^k \rangle = \lambda_{ijmn}^k (\langle \varepsilon_{\alpha\beta}^k \rangle) \langle \varepsilon_{mn}^k \rangle, \quad (13)$$

откуда усреднением по макрообъему находим выражение для макронапряжений  $N$ -компонентного материала

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \sum_{k=1}^N c_k \lambda_{ijmn}^k (\langle \varepsilon_{\alpha\beta}^k \rangle) \langle \varepsilon_{mn}^k \rangle. \quad (14)$$

Усредним интегральное уравнение (9) по условной плотности  $f(\varepsilon_{ij}^{(1)}, \varepsilon_{ij}^{(2)}, \lambda_{ijmn}^{(2)} |_{\nu}^{(1)})$  (плотность распределения деформаций в точках  $x_r^{(1)}$ ,  $x_r^{(2)}$  и модулей упругости в точке  $x_r^{(2)}$  при условии, что точка  $x_r^{(1)}$  находится в  $\nu$ -компоненте). Тогда, пренебрегая флуктуациями деформаций в пределах компонента, получим систему нелинейных алгебраических уравнений относительно средних по компонентам деформаций

$$\langle \varepsilon_{ij}^{\nu} \rangle = \langle \varepsilon_{ij} \rangle + \sum_{n=1}^N K_{ijpq}^{\nu k} [\lambda_{pqmn}^k (\langle \varepsilon_{\alpha\beta}^k \rangle) - \lambda_{pqmn}^c] \langle \varepsilon_{mn}^k \rangle \quad (\nu = 1, \dots, N). \quad (15)$$

Матричный оператор  $K_{ijpq}^{\nu k}$  определяется, согласно (10), равенством

$$K_{ijpq}^{\nu k} = K_{ijpq}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) p_{\nu k}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) \quad (\nu, k = 1, \dots, N), \quad (16)$$

где  $p_{\nu k}(x_r^{(1)} - x_r^{(2)}) = f(k^{(2)}|_{\nu}^{(1)})$  — вероятность перехода из  $\nu$ -компонента в точке  $x_r^{(1)}$  в  $k$ -компонент в точке  $x_r^{(2)}$ , удовлетворяющая условиям

$$c_k p_{\nu k}(x_r) = c_{\nu} p_{\nu k}(x_r), \quad p_{\nu k}(0) = \delta_{\nu k}, \quad p_{\nu k}(\infty) = c_k, \quad \sum_{k=1}^N p_{\nu k}(x_r) = 1. \quad (17)$$

Рассмотрим двухкомпонентный композитный материал с изотропной матрицей и изотропными однонаправленными квазисфероидальными включениями, т. е.

$$\lambda_{ijmn}^k(\langle \varepsilon_{\alpha\beta}^k \rangle) = \lambda_k(\langle \varepsilon_{\alpha\beta}^k \rangle) \delta_{ij} \delta_{mn} + 2\mu_k(\langle \varepsilon_{\alpha\beta}^k \rangle) I_{ijmn} \quad (k = 1, 2), \quad (18)$$

$$\lambda_{ijmn}^c = \lambda_c \delta_{ij} \delta_{mn} + 2\mu_c I_{ijmn}, \quad p_{\nu k} = c_k + (\delta_{\nu k} - c_k) \exp \left[ -\sqrt{n_1^2(x_1^2 + x_2^2) + n_2^2 x_3^2} \right],$$

где  $\lambda_k, \mu_k, \lambda_c, \mu_c$  — модули упругости компонентов и тела сравнения;  $I_{ijmn} = (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm})/2$  — единичный тензор;  $n_1, n_2$  — величины, обратные к полуосям квазисфероидальных включений в поперечном и продольном направлениях. В этом случае оператор (16) имеет вид

$$K_{ijpq}^{\nu k} = (\delta_{\nu k} - c_k) \{ a_1 \delta_{ij} \delta_{pq} + a_2 I_{ijpq} + a_3 [\delta_{ij} \delta_{3p} \delta_{3q} + \delta_{i3} \delta_{j3} (\delta_{pq} - 2\delta_{3p} \delta_{3q}) + a_4 \delta_{i3} \delta_{j3} \delta_{3p} \delta_{3q}] + a_5 (I_{i3pq} \delta_{j3} + I_{j3pq} \delta_{i3} - 2\delta_{i3} \delta_{j3} \delta_{3p} \delta_{3q}) \},$$

$$a_1 = \frac{(\lambda_c + \mu_c)(1 - s_1 - s_2)}{8\mu_c(\lambda_c + 2\mu_c)}, \quad a_2 = -\frac{(\lambda_c + 3\mu_c)(1 - s_1) + (\lambda_c + \mu_c)s_2}{4\mu_c(\lambda_c + 2\mu_c)},$$

$$a_3 = \frac{(\lambda_c + \mu_c)(s_1 + 5s_2 - 1)}{8\mu_c(\lambda_c + 2\mu_c)}, \quad a_4 = \frac{\lambda_c + 5\mu_c - (\lambda_c + 13\mu_c)s_1 - 5(\lambda_c + \mu_c)s_2}{8\mu_c(\lambda_c + 2\mu_c)},$$

$$a_5 = \frac{\mu_c - (2\lambda_c + 5\mu_c)s_1 + 5(\lambda_c + \mu_c)s_2}{4\mu_c(\lambda_c + 2\mu_c)}, \quad (19)$$

$$s_1 = \frac{1 - s}{1 - n^2}, \quad s_2 = \frac{1 - (1 + 2n^2)s_1}{2(1 - n^2)}, \quad n = \frac{n_1}{n_2},$$

$$s = \begin{cases} -\frac{n}{\sqrt{n^2 - 1}} \ln(n - \sqrt{n^2 - 1}), & n \geq 1, \\ \frac{n}{\sqrt{n^2 - 1}} \arcsin \sqrt{1 - n^2}, & n \leq 1. \end{cases}$$

Отсюда, как предельные случаи при  $n = 0, n = \infty, n = 1$ , следуют выражения оператора для слоистых, однонаправленных волокнистых и зернистых материалов соответственно.

**Деформирование слоистого композита с пористыми компонентами.** Будем считать, что модули объемного сжатия неразрушенных частей слоев  $K_1, K_2$  постоянны, а модули сдвига  $\mu_1, \mu_2$  задаются функциями

$$\mu_i(J_{\varepsilon}^i) = \begin{cases} \mu_{i0}, & J_{\varepsilon}^i < \frac{k_i}{2\mu_{i0}}, \\ \mu_i' + \left(1 - \frac{\mu_i'}{\mu_{i0}}\right) \frac{k_i}{2J_{\varepsilon}^i}, & J_{\varepsilon}^i \geq \frac{k_i}{2\mu_{i0}}, \end{cases} \quad (20)$$

$$J_{\varepsilon}^i = (\langle \varepsilon_{pq}^i \rangle' \langle \varepsilon_{pq}^i \rangle')^{1/2} \quad (i = 1, 2),$$

где  $\langle \varepsilon_{pq}^i \rangle'$  – девиатор средних по неразрушенной части  $i$ -компонента деформаций. При этом, согласно (15)–(19), для  $n = 1$  деформации  $\langle \varepsilon_{pq}^i \rangle$  и эффективные модули пористых волокон и связующего  $K_\nu^*$ ,  $\mu_\nu^*$  определяются соотношениями:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{pq}^\nu \rangle &= \left[ \frac{\bar{K}_\nu}{\bar{K}_\nu + K_\nu p_\nu} V_{ijpq} + \frac{\bar{\mu}_\nu}{\bar{\mu}_\nu + \mu_\nu (J_\varepsilon^\nu)} D_{ijpq} \right] \langle \varepsilon_{pq}^{*\nu} \rangle, \\ K_\nu^* &= \frac{4\mu_{\nu 0} \xi_\nu (1-p_\nu)^2}{4 + (3\xi_\nu - 4)p_\nu}, \quad \mu_\nu^* = \frac{\mu_{\nu 0} \hat{\mu}_\nu (J_\varepsilon^\nu) (1-p_\nu)^2}{1 + [\eta_\nu \hat{\mu}_\nu (J_\varepsilon^\nu) - 1] p_\nu}, \quad \mu_{\nu 0}^* = \frac{\mu_{\nu 0} (1-p_\nu)^2}{1 + (\eta_\nu - 1)p_\nu}, \\ \mu_\nu &= \mu_{\nu 0} \hat{\mu}_\nu (J_\varepsilon^\nu), \quad \bar{K}_\nu = \frac{4}{3} \mu_{\nu 0} (1-p_\nu), \quad \bar{\mu}_\nu = \frac{1}{\eta_\nu} \mu_{\nu 0} (1-p_\nu), \quad \xi_\nu = \frac{K_\nu}{\mu_{\nu 0}}, \\ \eta_\nu &= \frac{6(K_\nu + 2\mu_{\nu 0})}{9K_\nu + 8\mu_{\nu 0}}, \quad V_{ijpq} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{pq}, \quad D_{ijpq} = \frac{1}{2} (\delta_{ip} \delta_{jq} + \delta_{iq} \delta_{jp} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{pq}) \quad (\nu = 1, 2). \end{aligned} \quad (21)$$

Средние деформации  $\langle \varepsilon_{ij}^{*\nu} \rangle$   $\nu$ -компонента связаны с макродеформациями  $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ , согласно (15)–(19) для  $n = 0$ , соотношениями

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_{11}^{*\nu} \rangle &= \langle \varepsilon_{11} \rangle, \quad \langle \varepsilon_{22}^{*\nu} \rangle = \langle \varepsilon_{22} \rangle, \quad \langle \varepsilon_{12}^{*\nu} \rangle = \langle \varepsilon_{12} \rangle, \\ \langle \varepsilon_{33}^{*\nu} \rangle &= s_{\nu 1}^* (\langle \varepsilon_{11} \rangle + \langle \varepsilon_{22} \rangle) + s_{\nu 2}^* \varepsilon_{33}, \quad \langle \varepsilon_{13}^{*\nu} \rangle = s_{\nu 3}^* \langle \varepsilon_{13} \rangle, \quad \langle \varepsilon_{23}^{*\nu} \rangle = s_{\nu 3}^* \langle \varepsilon_{23} \rangle, \end{aligned} \quad (22)$$

где коэффициенты  $s_{\nu 1}^*$ ,  $s_{\nu 2}^*$ ,  $s_{\nu 3}^*$  определяются формулами

$$\begin{aligned} s_{\nu 1}^* &= \frac{1}{\lambda_\nu^* + 2\mu_\nu^*} \left[ \left( \frac{c_1 \lambda_1^*}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2 \lambda_2^*}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right) \left( \frac{c_1}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right)^{-1} - \lambda_\nu^* \right], \\ s_{\nu 2}^* &= \frac{1}{\lambda_\nu^* + 2\mu_\nu^*} \left[ 2 \frac{c_1 \mu_1^* (\lambda_2^* + 2\mu_2^*) + c_2 \mu_2^* (\lambda_1^* + 2\mu_1^*)}{c_1 (\lambda_2^* + 2\mu_2^*) + c_2 (\lambda_1^* + 2\mu_1^*)} + \lambda_\nu^* \right], \\ s_{\nu 3}^* &= \frac{1}{\mu_\nu} \frac{\mu_1^* \mu_2^*}{c_1 \mu_2^* + c_2 \mu_1^*}, \quad \lambda_\nu^* = K_\nu^* - \frac{2}{3} \mu_\nu^*. \end{aligned} \quad (23)$$

Эффективные модули слоистого двухкомпонентного материала определяются, согласно (14), (18), (19) для  $n = 0$ , выражениями

$$\begin{aligned} \lambda_{11}^* &= \left( \frac{c_1 \lambda_1^*}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2 \lambda_2^*}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right)^2 \left( \frac{c_1}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right)^{-1} + \\ &+ 4 \left[ \frac{c_1 \mu_1^* (\lambda_1^* + \mu_1^*)}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2 \mu_2^* (\lambda_2^* + \mu_2^*)}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right], \\ \lambda_{12}^* &= \left( \frac{c_1 \lambda_1^*}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2 \lambda_2^*}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right)^2 \left( \frac{c_1}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right)^{-1} + 2 \left[ \frac{c_1 \lambda_1^* \mu_1^*}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2 \lambda_2^* \mu_2^*}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right], \\ \lambda_{13}^* &= \left( \frac{c_1 \lambda_1^*}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2 \lambda_2^*}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right) \left( \frac{c_1}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right)^{-1}, \\ \lambda_{33}^* &= \left( \frac{c_1}{\lambda_1^* + 2\mu_1^*} + \frac{c_2}{\lambda_2^* + 2\mu_2^*} \right)^{-1}, \quad \lambda_{44}^* = 2 \left( \frac{c_1}{\mu_1^*} + \frac{c_2}{\mu_2^*} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (24)$$

Из соотношений (21)–(23) находим

$$\begin{aligned}
 J_\varepsilon^\nu &= \frac{1 - p_\nu}{1 + [\eta_\nu \widehat{\mu}_\nu(J_\varepsilon^\nu) - 1] p_\nu} J_\varepsilon^{*\nu}, \\
 J_\varepsilon^{*\nu} &= \left\{ \left[ 1 + s_{\nu 1}^{*2} - \frac{1}{3}(1 + s_{\nu 1}^*)^2 \right] (\langle \varepsilon_{11} \rangle + \langle \varepsilon_{22} \rangle)^2 - 2\langle \varepsilon_{11} \rangle \langle \varepsilon_{22} \rangle + \right. \\
 &\quad + 2 \left[ s_{\nu 1}^* s_{\nu 2}^* - \frac{1}{3} \left( 1 + s_{\nu 1}^* \right) s_{\nu 2}^* \right] \left( \langle \varepsilon_{11} \rangle + \langle \varepsilon_{22} \rangle \right) \langle \varepsilon_{33} \rangle + \frac{2}{3} s_{\nu 2}^{*2} \langle \varepsilon_{33} \rangle^2 + \\
 &\quad \left. + 2[\langle \varepsilon_{12} \rangle^2 + s_{\nu 3}^{*2} (\langle \varepsilon_{13} \rangle^2 + \langle \varepsilon_{23} \rangle^2)] \right\}^{1/2} \quad (\nu = 1, 2).
 \end{aligned} \tag{25}$$

**Кратковременная повреждаемость слоистого композита при деформационном критерии микропрочности.** Процессы повреждаемости компонентов слоистого материала будем описывать рассеянным разрушением микрообъемов. Если исходить из условия разрушения микрообъема материала в виде силового критерия микропрочности, то для физически нелинейного материала поврежденность можно определить лишь для восходящей части диаграммы деформирования микрообъема [4]. Для оценки полного ресурса работы физически нелинейного материала, включающего ниспадающий участок диаграммы деформирования, примем условие кратковременного разрушения микрообъема неразрушенной части  $\nu$ -компонента в виде деформационного критерия прочности

$$J_\varepsilon^\nu = r_\nu \quad (\nu = 1, 2), \tag{26}$$

где предел прочности  $r_\nu$  образует эргодическое случайное поле.

Одноточечную функцию распределения  $F_\nu(r_\nu)$  будем аппроксимировать распределением Вейбулла

$$F_\nu(r_\nu) = \begin{cases} 0, & r_\nu < r_{\nu 0}, \\ 1 - \exp[-m_\nu(r_\nu - r_{\nu 0})^{n_\nu}], & r_\nu \geq r_{\nu 0}, \end{cases} \tag{27}$$

где  $r_{\nu 0}$  — минимальное значение микропрочности  $\nu$ -компонента по деформационному критерию;  $m_\nu, n_\nu$  — постоянные.

Если разрушенные микрообъемы моделировать случайно расположенными квазисферическими пораами, то, исходя из свойств одноточечной функции распределения  $F_\nu(r_\nu)$  эргодического случайного поля  $r_\nu$ , можем записать уравнение баланса поврежденности (пористости)  $\nu$ -компонента

$$p_\nu = p_{\nu 0} + (1 - p_{\nu 0}) F_\nu(J_\varepsilon^\nu) \quad (\nu = 1, 2). \tag{28}$$

На основе (25), (28) получим систему нелинейных уравнений относительно инвариантов  $J_\varepsilon^\nu$  и пористостей  $p_\nu$

$$\begin{aligned}
 J_\varepsilon^\nu \{1 + [\eta_\nu \widehat{\mu}_\nu(J_\varepsilon^\nu) - 1] p_\nu\} &= (1 - p_\nu) \left\{ \left[ 1 + s_{\nu 1}^{*2} - \frac{1}{3}(1 + s_{\nu 1}^*)^2 \right] (\langle \varepsilon_{11} \rangle + \langle \varepsilon_{22} \rangle)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - 2\langle \varepsilon_{11} \rangle \langle \varepsilon_{22} \rangle + 2 \left[ s_{\nu 1}^* s_{\nu 2}^* - \frac{1}{3} (1 + s_{\nu 1}^*) s_{\nu 2}^* \right] (\langle \varepsilon_{11} \rangle + \langle \varepsilon_{22} \rangle) \langle \varepsilon_{33} \rangle + \frac{2}{3} s_{\nu 2}^{*2} \langle \varepsilon_{33} \rangle^2 + \right. \\
 &\quad \left. + 2[\langle \varepsilon_{12} \rangle^2 + s_{\nu 3}^{*2} (\langle \varepsilon_{13} \rangle^2 + \langle \varepsilon_{23} \rangle^2)] \right\}^{1/2}
 \end{aligned}$$

$$+ 2 \left[ \langle \varepsilon_{12} \rangle^2 + s_{\nu 3}^{*2} \left( \langle \varepsilon_{13} \rangle^2 + \langle \varepsilon_{23} \rangle^2 \right) \right]^{1/2}, \quad (29)$$

$$p_\nu = p_{\nu 0} + (1 - p_{\nu 0}) F_\nu(J_\varepsilon^\nu) \quad (\nu = 1, 2).$$

**Численные результаты.** Численное исследование совместных процессов деформирования и повреждаемости проведено для слоистого двухкомпонентного композита на основе стекла и эпоксидного связующего, диаграмма деформирования которого имеет ниспадающий участок, с безразмерными численными значениями характеристик

$$\frac{K_1}{\mu_{20}} = 33,584; \quad \frac{\mu_1}{\mu_{20}} = 25,188; \quad \frac{K_2}{\mu_{20}} = 3,238; \quad \frac{k_2}{\mu_{20}} = 0,02207; \quad \frac{\mu'_2}{\mu_{20}} = -0,05. \quad (30)$$

Одноточечная функция распределения предела микропрочности связующего принята в виде распределения Вейбулла

$$F_2(r_2) = \begin{cases} 0, & r_2 < r_{20}, \\ 1 - \exp[-m_2(r_2 - r_{20})^{n_2}], & r_2 \geq r_{20}, \end{cases} \quad (31)$$

$$m_2 = 1000; \quad n_2 = 2; \quad r_{20} = 0,05; \quad p_{20} = 0.$$

Материал наполнителя принят линейно упругим, причем повреждаемость в нем отсутствует ( $p_1 = p_{10} = 0$ ).

Численные решения нелинейных уравнений (29) с учетом соотношений (21), (23), (24), для слоистого композита при заданных одноосных макродеформациях

$$\langle \varepsilon_{11} \rangle \neq 0, \quad \langle \sigma_{22} \rangle = \langle \sigma_{33} \rangle = \langle \sigma_{12} \rangle = \langle \sigma_{13} \rangle = \langle \sigma_{23} \rangle = 0, \quad (32)$$

$$\langle \varepsilon_{33} \rangle \neq 0, \quad \langle \sigma_{11} \rangle = \langle \sigma_{22} \rangle = \langle \sigma_{12} \rangle = \langle \sigma_{13} \rangle = \langle \sigma_{23} \rangle = 0 \quad (33)$$

представлены соответственно на рис. 1, 2 и 3, 4, в виде зависимостей пористости  $p_2$ , макронапряжений  $\langle \bar{\sigma}_{11} \rangle = \langle \sigma_{11} \rangle / \mu_{20}$ ,  $\langle \bar{\sigma}_{33} \rangle = \langle \sigma_{33} \rangle / \mu_{20}$  соответственно от макродеформаций  $\langle \varepsilon_{11} \rangle$

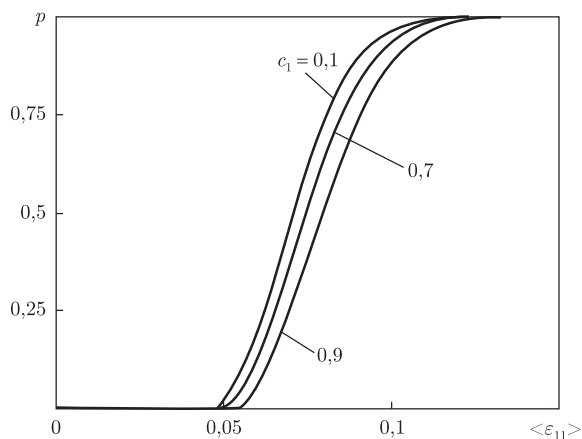


Рис. 1

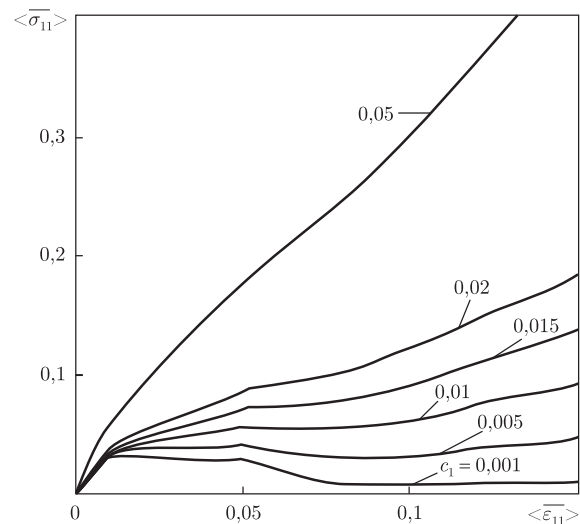


Рис. 2

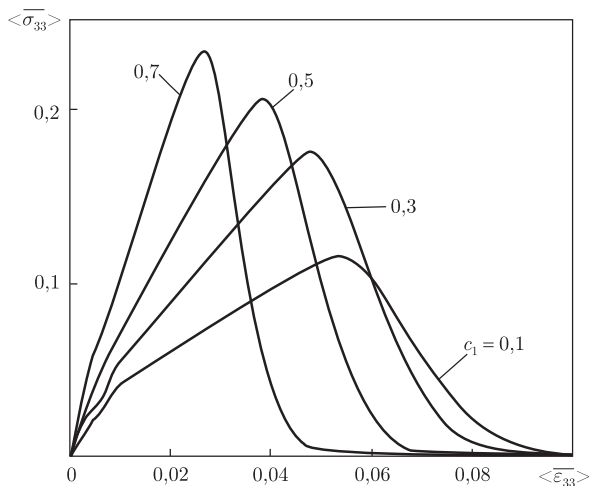


Рис. 3

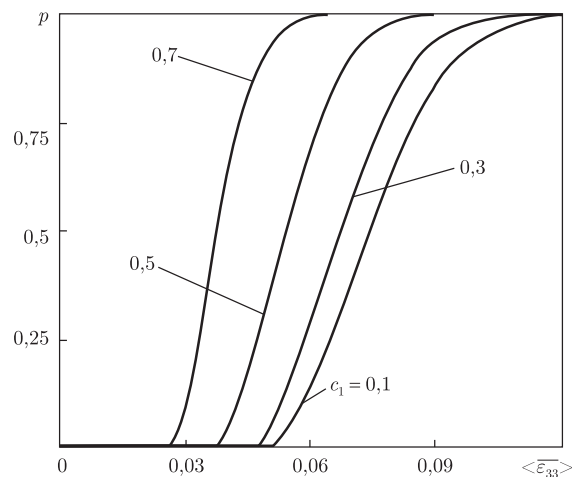


Рис. 4

и  $\langle \varepsilon_{33} \rangle$  для различных значений объемного содержания стеклонеполнителя  $c_1$ . Как видим, при одноосном растяжении поперек слоев (33) повреждаемость связующего существенно зависит от объемного содержания стеклонеполнителя  $c_1$  (см. рис. 3), возрастая с его ростом. При одноосном растяжении вдоль слоев (31) повреждаемость связующего менее существенно зависит от объемного содержания стеклонеполнителя  $c_1$  (см. рис. 1), причем она убывает с его ростом. Диаграммы деформирования при растяжении поперек слоев (см. рис. 4) имеют восходящие и нисходящие участки, отличаясь только количественно в зависимости от объемного содержания стеклонеполнителя  $c_1$  (см. рис. 4). Нисходящие участки обусловлены совместным влиянием нелинейности и повреждаемости связующего. При растяжении вдоль слоев влияние нелинейности и повреждаемости связующего на диаграммы деформирования является существенным лишь в интервале  $0,001 \leq c_1 \leq 0,05$  (см. рис. 2). При этом в интервале  $0 < c_1 \leq 0,012$  диаграммы деформирования имеют три участка — восходящий, нисходящий и снова восходящий.

1. Khoroshun L. P. Principles of the micromechanics of material damage. 1. Short-term damage // Int. Appl. Mech. – 1998. – **34**, No 10. – P. 1035–1041.
2. Khoroshun L. P. Micromechanics of Short-term thermal microdamageability // Ibid. – 2001. – **37**, No 9. – P. 1158–1165.
3. Khoroshun L. P. Principles of the micromechanics of material damage. 2. Long-term damage // Ibid. – 2007. – **43**, No 2. – P. 127–135.
4. Khoroshun L. P., Shikula E. N. Deformation and damage of composite materials of stochastic structure: physically nonlinear problems (review) // Ibid. – 2012. – **48**, No 4. – P. 359–413.
5. Khoroshun L. P. Structural short-term damage model with a strain-based microfailure criterion // Ibid. – 2013. – **49**, No 1. – P. 62–72.
6. Khoroshun L. P., Nazarenko L. V. Deformation and damage of composites with anisotropic components (review) // Ibid. – 2013. – **49**, No 4. – P. 388–455.
7. Khoroshun L. P. Mathematical models and methods of the mechanics of stochastic composites // Ibid. – 2000. – **36**, No 10. – P. 1284–1316.



Член-кореспондент НАН України **Л. П. Хорошун**

**Побудова моделі деформування і короткочасної пошкоджуваності шаруватого композита на основі деформаційного критерію мікроміцності**

*Побудовано структурну модель зв'язаних процесів деформування і короткочасної пошкоджуваності шаруватих композитів з фізично нелінійними компонентами, діаграми деформування яких мають спадаючі гілки. Пошкоджуваність моделюється розсіяним руйнуванням мікрооб'ємів компонентів і утворенням на їх місці стохастично розташованих квазісферичних мікропор. Умовою короткочасного руйнування мікрооб'єму матеріалу прийнято деформаційний критерій міцності відносно другого інваріанта девіатора мікродеформацій. Досліджено вплив об'ємного вмісту компонентів на деформування і пошкоджуваність шаруватого композита.*

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **L. P. Khoroshun**

**Construction of a model of deformation and short-time damageability for a laminate composite on the basis of the deformation criterion of microstrength**

*A structural theory of the coupled processes of deformation and short-time damageability for laminate composites with physically nonlinear components and with the decreasing branches of deformation diagrams is constructed. The damageability is modeled by the dispersed destruction of microvolumes of a material and the formation of stochastically arranged quasispherical micropores instead of them. As a condition of short-time destruction of a microvolume of the material, the deformation criterion of strength relative to the second invariant of the deviator of microstrains is assumed. A regularity of the effect of volume components on the deformation and damageability of the laminate composite is studied.*



УДК 533.1,533.77,535.14,536.

Член-кореспондент НАН України Ю. В. Слюсаренко, Н. П. Бойченко

## Бозе-ейнштейнівський конденсат фотонів і зупинка світла в ультрахолодних газах бозе-атомів

*Досліджено можливість утворення бозе-конденсату у газі фотонів, що знаходяться в термодинамічній рівновазі з ідеальним газом дворівневих бозе-атомів нижче температури виродження. Визначено умови співіснування бозе-конденсатів в атомарних і фотонних підсистемах. Запропоновано трактовку явища зупинки світла у бозе-конденсаті атомів як наслідок “лавиноподібної” конденсації фотонів.*

Бозе-ейнштейнівська конденсація (БЕК) є яскравим проявом квантової природи речовини на макроскопічному рівні. Це явище лежить в основі багатьох фізичних ефектів, таких, наприклад, як надплинність або надпровідність. Пряма експериментальна реалізація явища БЕК у парах лужних металів (див. [1–3]) дала змогу передбачити й експериментального виявити нові ефекти, можливі у системах із бозе-конденсатом [4–11].

Для завершеності загальної картини чисто академічних досліджень не вистачало експериментальної реалізації явища БЕК фотонів. Головна причина такого стану полягала в тому, що експерименти не проводились у системах фотонів у рівновазі із середовищем аж до появи робіт [12, 13]. Експериментальну реалізацію бозе-конденсації фотонів у такій системі відразу було розцінено як науковий “прорив”. Це було пов’язано не тільки із самим фактом отримання конденсату фотонів і з давнім його очікуванням, але також і з тією обставиною, що умови БЕК фотонів були досягнуті при кімнатній температурі. Крім того, відразу почали зазначати можливості практичних застосувань реалізованого явища. Наприклад, для збору й фокусування сонячних променів у сонячних батареях при похмурій погоді, створення нових джерел короткохвильового лазерного випромінювання, зменшення розмірів електронних пристроїв (мікрочипів) тощо. Зрозуміло, що з цією метою дослідження явища треба продовжити в низці “академічних” напрямків, серед яких визначення умов реалізації БЕК фотонів у різних середовищах, дослідження температурних діапазонів реалізації станів з БЕК фотонів, у тому числі умов співіснування бозе-конденсатів атомів і фотонів, зокрема, в атомарних газах. Останнє питання передбачає дослідження термодинамічної рівноваги вільних фотонів та атомарних газів в області наднизьких температур, де можлива бозе-конденсація атомів. Розгляду цього питання і присвячено дану роботу.

© Ю. В. Слюсаренко, Н. П. Бойченко, 2014

**Рівняння термодинамічної рівноваги фотонів із дворівневими атомами ідеального газу.** Будемо виходити з того, що є ідеальний газ дворівневих атомів і фотони. Це означає, що атом може знаходитися тільки в двох енергетичних станах — основному стані з набором квантових чисел  $\alpha_1$  та збудженому, що характеризується набором квантових чисел  $\alpha_2$ , причому збуджений стан може вважатися зв'язаним станом вільного атома з фотоном. Усі три компоненти системи — збуджені, незбуджені атоми й фотони знаходяться у термодинамічній рівновазі між собою. Функції розподілу атомів в обох станах задаються формулами

$$f_{\alpha_i}(\mathbf{p}) = \left\{ \exp\left(\frac{\varepsilon_{\alpha_i}(\mathbf{p}) - \mu_i}{T}\right) - 1 \right\}^{-1}, \quad \varepsilon_{\alpha_i}(\mathbf{p}) = \varepsilon_{\alpha_i} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

де величини  $\varepsilon_{\alpha_i}$ ,  $i = 1, 2$ , є енергіями рівнів нерухомих атомів (причому  $\varepsilon_{\alpha_i} < 0$ ), а їх хімічні потенціали позначено як  $\mu_i$ ,  $i = 1, 2$ . Для фотонів же функція розподілу має вигляд:

$$f_{\text{ph}}(\mathbf{k}) = \left\{ \exp\left(\frac{\hbar\omega(\mathbf{k}) - \mu^*}{T}\right) - 1 \right\}^{-1}, \quad (2)$$

де  $\omega(\mathbf{k})$  — закон дисперсії фотонів, а  $\mu^*$  — їх хімічний потенціал. Наявність відмінного від нуля хімічного потенціалу фотонів указує на те, що зберігається загальне число фотонів у системі  $N_{\text{ph}}$  (вільних фотонів і фотонів, що поглинуті атомами, які внаслідок цього переходять до збудженого стану).

У даній роботі ми не будемо обговорювати причину зберігання загального числа фотонів у системі. Можна, наприклад, вважати, що загальне число фотонів зберігається завдяки особливій системі дзеркал з високими відбивальними властивостями [12, 13].

Оскільки сумарне число атомів  $N$  і фотонів  $N_{\text{ph}}$  у системі вважається незмінним, з урахуванням формул (1), (2) маємо такі рівняння балансу:

$$\begin{aligned} n &= \frac{g_{\alpha_1}}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\exp\left[\frac{\varepsilon_{\alpha_1} - \mu_1 + (p^2/2m)}{T}\right] - 1} + \frac{g_{\alpha_2}}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\exp\left[\frac{\varepsilon_{\alpha_2} - \mu_2 + (p^2/2m)}{T}\right] - 1}, \\ n_p &= \frac{g_p}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\exp\left[\frac{\hbar\omega_0 - \mu^* + (p^2/2m)}{T}\right] - 1} + \frac{g_{\alpha_2}}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{\exp\left[\frac{\varepsilon_{\alpha_2} - \mu_2 + (p^2/2m)}{T}\right] - 1}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\mu_1 + \mu^* = \mu_2,$$

де  $n \equiv N/V$  — густина атомів;  $n_{\text{ph}} \equiv N_{\text{ph}}/V$  — густина фотонів;  $V$  — об'єм системи та  $g_{\alpha_1}$ ,  $g_{\alpha_2}$  — параметри, що характеризують кратність виродження рівнів атомів з наборами квантових чисел  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ . Для атомів це може бути, наприклад, виродження за спіновими станами. Для фотонів  $g^*$  характеризує кратність виродження стану зі значенням хвильового вектора  $\mathbf{k}$  і може бути пов'язана, наприклад, із поляризацією фотонів. Наявність спінових змінних у частинок системи у цій роботі враховуватися не буде. Третє з рівнянь (3) є умовою рівноваги фаз (умова “хімічної реакції”). При виведенні рівнянь (3) вважалося, що закон дисперсії квадратичний за хвильовим вектором і задається формулою

$$\hbar\omega(\mathbf{k}) \equiv \hbar\omega(k) = \hbar\omega_0 + \frac{p^2}{2m^*}, \quad p \equiv \hbar k, \quad (4)$$

де  $\omega_0$  — частота обрізки спектра фотона і  $m^*$  — ефективна маса фотона у речовині є пов'язаними між собою величинами (див. у цьому зв'язку [12–14]). Відзначимо, що поздовжні й поперечні хвилі в плазмі мають закони дисперсії, відповідні формулі (4) (див. наприклад, [15]).

**Умови співіснування бозе-конденсатів у фотонній підсистемі та підсистемі незбуджених атомів.** Використаємо одержані рівняння (3) для вивчення умов утворення конденсату фотонів в області температур, близьких до температур вироджених атомарних газів, які також можуть утворювати бозе-конденсат. Тут ми розглянемо лише випадок, коли можливе співіснування у системі БЕК незбуджених атомів і фотонів. Оскільки всі компоненти системи є ідеальними газами, умова формування зазначених конденсатів вимагає виконання рівностей (див., наприклад, [15]):

$$\mu^*|_{T \leq T_c^*} = \hbar\omega_0, \quad \mu_1|_{T \leq T_c} = \varepsilon_1, \quad (5)$$

де введено до розгляду температуру конденсації атомів в основному стані  $T_c$  і температуру  $T_c^*$ , при якій починається формування БЕК у фотонному компоненті. Зауважимо, що співвідношення (5) у відповідності з (3) однозначно визначають і хімічний потенціал  $\mu_2$ ,  $\mu_2|_{T \leq T_c} = \varepsilon_1 + \hbar\omega_0$ . Нагадаємо далі, що у точках переходу густини бозе-конденсатів  $n_{\alpha_1}^0(T)$  і  $n_{\text{ph}}^0(T)$  мають дорівнювати нулю

$$n_{\alpha_1}^0(T_c) = 0, \quad n_{\text{ph}}^0(T_c^*) = 0. \quad (6)$$

Таким чином, рівняння (3), (6) з урахуванням виразів (5) мають слугувати для визначення температур переходу  $T_c$  та  $T_c^*$ . Модифікуванням методики [15] на випадок багатокомпонентних систем (див. також [14]) із рівнянь (3) з урахуванням (5), (6) можна одержати вирази для густин  $n_{\alpha_1}^0(T)$  і  $n_{\text{ph}}^0(T)$  бозе-конденсатів у атомарному й фотонному компонентах. При цьому необхідно врахувати, що відношення мас  $m^*/m$  дуже мале. Автори [12, 13] оцінювали масу  $m^*$  величиною  $6,7 \cdot 10^{-33}$  г (див. також [14]). Навіть для атома літію співвідношення мас буде  $(m^*/m) \sim 10^{-10}$ . Із цієї причини найбільш цікавим виявляється випадок, коли між параметрами задачі виконуються співвідношення  $T_c^* \lesssim T_c$ ,  $(m^*/m)^{3/2} \ll \exp(-\Delta/T_c^*)$ ,  $1 \gg T_c^*/|\Delta| > 1/30$ , де  $\Delta \equiv \varepsilon_{\alpha_2} - \varepsilon_{\alpha_1} - \hbar\omega_0$ . Завдяки цим нерівностям величину  $T_c^*$ , використовуючи (3), (5), (6), можна визначити з рівняння

$$n_{\text{ph}} = g_{\alpha_2} \left( \frac{m T_c^*}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp(-\Delta/T_c^*) \approx T_c \left( \frac{g_{\alpha_1} n_{\text{ph}} h}{\zeta(3/2) g_{\alpha_2} n} \right)^{2/3} \exp\left( \frac{2}{3} \frac{\Delta}{T_c^*} \right), \quad (7)$$

де  $\zeta(x)$  — дзета-функція Рімана. Видно, що залежність критичних температур  $T_c^*$  і  $T_c$  від густин фотонів  $n_{\text{ph}}$  і атомів  $n$  значно відрізняється від степеневі залежності, “традиційної” для точок переходу до станів із БЕК в ідеальних газах (див., наприклад, [15]). Уперше на таку “нетрадиційну” поведінку температури конденсації фотонів було вказано в [14]. Це рівняння для  $T_c^*$  є трансцендентним і може бути розв'язане тільки чисельно. Наприклад, при  $(T_c^*/T_c) \sim 1$  для  $(T_c^*/\Delta) \approx 0,1$  із (8) маємо  $(n_{\text{ph}}/n) \sim \exp(-\Delta/T_c^*) \approx 4,5 \cdot 10^{-5}$ . Звідси випливає, що при густинах числа частинок  $n \sim 10^{12} - 10^{14}$  см<sup>-3</sup>, характерних для експериментів із БЕК в ультрахолодних газах [1–3], описана нами ситуація може реалізуватися при  $n_{\text{ph}} \sim 10^7 - 10^9$  см<sup>-3</sup>.

Видно, що залежність критичної температури  $T_c^*$  від густини фотонів значно відрізняється від степеневі залежності, “традиційної” для точок переходу до станів із БЕК в ідеальних газах (див., наприклад, [15]). Уперше на таку “нетрадиційну” поведінку температури конденсації фотонів було вказано в [14].

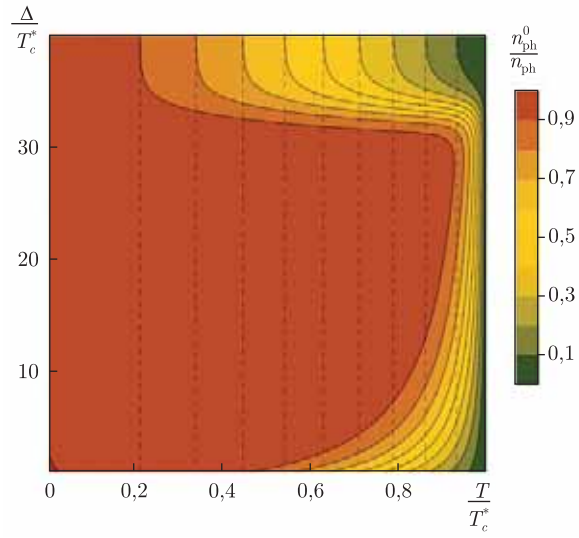


Рис. 1. Ілюстрація можливості “лавиноподібної” конденсації фотонів у рівновазі з ультрахолодними газами з БЕК

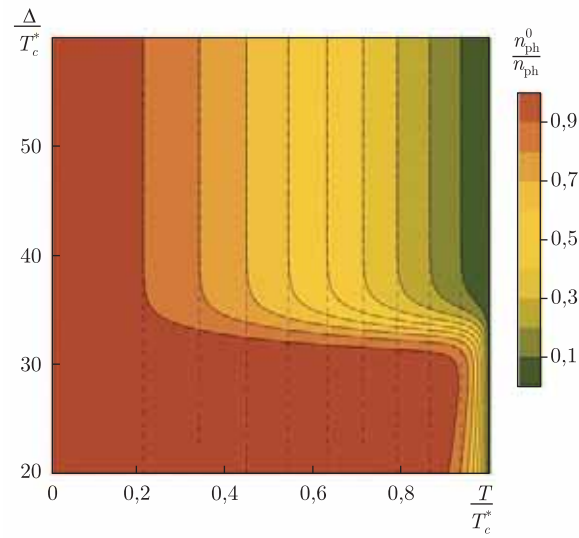


Рис. 2. Перехід до степеневому режиму конденсації фотонів при великих значеннях  $\Delta$

Виходячи з формул (3)–(7), можна одержати наближені вирази для густин БЕК атомів  $n_{\alpha_1}^0(T)$  и фотонів  $n_{\text{ph}}^0(T)$  при даних умовах у системі:

$$\begin{aligned} n_{\alpha_1}^0(T) &\approx n \left\{ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right\}, \\ n_{\text{ph}}^0(T) &\approx n_{\text{ph}} \left\{ 1 - \left( \frac{T}{T_c^*} \right)^{3/2} \exp \left[ -\Delta \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_c^*} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Із (8) видно, що утворення БЕК фотонів відбувається різко, “лавинopodobно” з пониженням температури, в чому легко переконатися з поведінки похідної

$$\left. \frac{\partial n_{\text{ph}}^0(T)}{\partial T} \right|_{T \lesssim T_c^*} \approx -\frac{n_{\text{ph}}}{T_c^*} \frac{\Delta}{T_c^*}, \quad \frac{\Delta}{T_c^*} \gg 1. \quad (9)$$

Справедливе й обернене твердження. А саме, що при підвищенні температури так же різко (або “лавинopodobно”) відбувається руйнування БЕК зі звільненням “полонених” конденсатом фотонів. На рис. 1 зображено поведінку відносної густини конденсату  $n_{\text{ph}}^0(T)/n_{\text{ph}}$  від безрозмірної температури  $T/T_c^*$  і параметра  $\Delta/T_c^*$ , що відповідає за застосовність низькотемпературного наближення в припущенні, що  $T_c^* \sim T_c$  при  $T_c^* \lesssim T_c$ .

На рис. 1 використано принцип розфарбовування географічних карт: чим більша “висота” рельєфу, тим темнішим кольором він відображується. Суцільні криві на рисунку є ізолініями, що сполучають точки з однаковим значенням  $n_{\text{ph}}^0(T)/n_{\text{ph}}$ . На рис. 1 видно області значень  $T/T_c^*$  і  $\Delta/T_c^*$  (широке “плоскогір’я”), в яких можлива “вибухова” конденсація фотонів із досягненням максимального значення величини  $n_{\text{ph}}^0(T)/n_{\text{ph}}$ . Можна помітити, що у верхній частині рисунку (при  $(\Delta/T_c^*) \sim 30$  і вище) режим конденсації фотонів змінюється — починає залежити степеневим чином від температури у відповідності з відомою для ідеальних газів бозе-атомів формулою  $n_{\text{ph}}^0(T) \approx n_{\text{ph}} \{ 1 - (T/T_c^*)^{3/2} \}$  (див. [15]), що і відображено на рис. 2.

Відзначимо, що в області температур  $T \ll T_c$ ,  $T_c^* < T_c$ ,  $(T_c/\Delta) \ll 1$  практично всі фотони в системі перебувають у стані БЕК і практично всі атоми (в незбудженому стані з набором квантових чисел  $\alpha_1$ ) знаходяться в БЕК. Пояснимо тепер, чому така ситуація може трактуватися як “зупинка світла” в БЕК (уперше на можливість такого явища було вказано в [9–11]). Якщо обчислити групову швидкість поширення електромагнітних хвиль у середовищі  $v_g$ , то у випадку квадратичного закону дисперсії фотонів (4) отримаємо  $v_g = \hbar k/m^*$ . Звідси й випливає, що оскільки бозе-конденсат формується фотонами з нульовим імпульсом (із нульовим значенням хвильового вектора  $k$ ), то для таких фотонів групову швидкість має дорівнювати нулю. Саме така ситуація й малася на думці у зробленому вище твердженні про зупинку світла в БЕК. Таким чином, формули (8), (9) свідчать про можливість “полону” фотонів газом у стані з БЕК із переведенням їх до когерентного стану, оскільки для всіх фотонів у конденсаті  $\omega(k)|_{k=0} = \omega_0$ .

Слід зауважити, що аналогічним чином можна поставити і задачу про формування БЕК фотонів у рівновазі з ідеальними фермі-газами нижче температур виродження останніх, модифікуючи незначно формули (1) і (3) (див. [14]). Попередні оцінки показують, що в таких системах густини БЕК фотонів мають бути надзвичайно малими у порівнянні з густинами газових компонентів, а температури переходу до БЕК фотонів набагато менші за характерні температури виродження ферміонних компонентів. Однак такі оцінки проводилися нами

в області фізичних параметрів задачі, зручних з точки зору аналітичних обчислень. Із цієї причини автори вважають, що таке дослідження є окремою задачею, що вимагає більш детального розгляду з використанням спеціальних чисельних методів. Слід також зазначити, що на розглянуті умови співіснування БЕК в атомарних компонентах і у фотонній підсистемі може чинити вплив взаємодія між атомами, процеси розсіяння фотонів атомами тощо. Однак урахування такого впливу є непростю задачею, що виходить, на наш погляд, за рамки цієї роботи. Причому, в основі її розв'язання має лежати мікроскопічний підхід, оснований на нерелятивістській квантовій електродинаміці.

1. *Anderson M. H., Ensher J. R., Matthews M. R., Wieman C. E., Cornell E. A.* Observation of Bose–Einstein condensation in a dilute atomic vapor // *Science*. – 1995. – **269**. – P. 198–201.
2. *Bradley C. C., Sackett C. A., Tollett J. J., Hulet R. G.* Evidence of Bose–Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – **75**. – P. 1687–1691.
3. *Davis K. B., Mewes M.-O., Andrews M. R., van Druten J. N., Durfee D. S., Kurn D. M., Ketterle W.* Bose–Einstein condensation in a gas of sodium atoms // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – **75**. – P. 3969–3973.
4. *Pitaevskii L., Stringari S.* Bose–Einstein condensation. – New York: Oxford Univ. Press, 2003. – 382 p.
5. *Pethick C. J., Smith H.* Bose–Einstein condensation in dilute gases (second edition). – Cambridge: Cambridge University Press, 2008. – 585 p.
6. *Hau L. V., Harris S. E., Dutton Z., Behroozi C. H.* Light speed reduction to 17 metres per second in an ultracold atomic gas // *Nature*. – 1999. – **397**. – P. 594–598.
7. *Slyusarenko Y. V., Sotnikov A. G.* Green-function method in the theory of ultraslow electromagnetic waves in an ideal gas with Bose–Einstein condensates // *Phys. Rev. A*. – 2008. – **78**. – 053622.
8. *Cornell E. A.* Stopping light in its tracks // *Nature*. – 2001. – **409**. – P. 461–462.
9. *Phillips D. F., Fleischhauer A., Mair A., Walsworth R. L., Lukin M. D.* Storage of light in atomic vapor // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – **86**. – P. 783–786.
10. *Liu C., Dutton Z., Behroozi C. H., Hau L. V.* Observation of coherent optical information storage in an atomic medium using halted light pulses // *Nature*. – 2001. – **409**. – P. 490–493.
11. *Slyusarenko Y. V., Sotnikov A. G.* Green-function method in the theory of ultraslow electromagnetic waves in an ideal gas with Bose–Einstein condensates // *Phys. Rev. A*. – 2011. – **83**. – 023601.
12. *Klaers J., Schmitt J., Vewinger F., Weitz M.* Bose–Einstein condensation of photons in an optical microcavity // *Nature*. – 2010. – **468**. – P. 545–548.
13. *Klaers J., Schmitt J., Damm T., Dung D., Vewinger F., Weitz M.* Bose–Einstein condensation of photons in a microscopic optical resonator: towards photonic lattices and coupled cavities // *Proc. SPIE* – 2013. – **8600**. – 86000L.
14. *Kruchkov A., Slyusarenko Yu.* Bose–Einstein condensation of photons in an ideal atomic gas // *Phys. Rev. A*. – 2013. – **88**. – 013615.
15. *Akhiezer A. I., Peletminskii S. V.* Methods of statistical physics. – Oxford: Pergamon Press, 1981. – 462 p.

*Інститут теоретичної фізики ім. О. І. Ахієзера  
ННЦ “ХФТІ”, Харків*

*Надійшло до редакції 10.02.2014*

Член-корреспондент НАН України **Ю. В. Слюсаренко, Н. П. Бойченко**

### **Бозе-эйнштейновский конденсат фотонов и остановка света в ультрахолодных газах бозе-атомов**

*Исследована возможность образования бозе-конденсата в газе фотонов, находящегося в термодинамическом равновесии с идеальным газом двухуровневых бозе-атомов ниже температуры вырождения. Определены условия сосуществования бозе-конденсатов в атомарных и фотонной подсистемах. Предложена трактовка явления остановки света в бозе-конденсате атомов как следствие “лавиноподобной” конденсации фотонов.*



Corresponding Member of the NAS of Ukraine **Yu. V. Slyusarenko, N. P. Boichenko**

**The photonic Bose–Einstein condensate and stopped light in ultracold atomic gases**

*We have studied a possibility of the Bose condensate formation in a gas of photons, which are in thermodynamic equilibrium with the ideal gas of two-level Bose atoms below the degeneracy temperature. The coexistence conditions for the Bose-condensates in the atomic and photonic subsystems are found. The “avalanche” mode of condensation of photons is proposed. Such situation can be interpreted as “stopped light” in the Bose-condensate of atoms.*





УДК 517.958:536.24

В. В. Панин, Ф. А. Кривошей, Ю. А. Богдан

## Стохастическая регуляризация некорректных задач теплопереноса

(Представлено академиком НАН Украины А. А. Халатовым)

*Стохастическая аппроксимация параболического уравнения теплопроводности и последующее его осреднение по реализациям случайных параметров приводит к уравнению гиперболического типа для средних значений функций переноса. На основе этого уравнения постановки обратных задач восстановления краевых условий корректны.*

Обширный класс некорректных задач математической физики составляют обратные задачи (ОЗ), возникающие при обработке и интерпретации результатов экспериментов [1]. При постановке обратных задач теплопереноса искомыми являются физические свойства веществ (теплопроводность, удельная теплоемкость) и краевые условия. Характерной особенностью ОЗ является, как известно, неустойчивость их решений по отношению к ошибкам экспериментальных данных. Физическим эквивалентом этой особенности является значительная неопределенность искомым решениям и вытекающая из нее проблема различимости и выделения “физических” решений. Оказалось, что возможность чисто детерминированными средствами исключить или, по меньшей мере, существенно сократить неопределенность решений ограничена [2]. Стремление преодолеть “информационную ограниченность”, присущую чисто детерминированным постановкам и методам решения ОЗ теплопереноса, привело к развитию направления и методов, базирующихся на более глубоких представлениях о вероятностной природе модели теплопереноса, результатов измерений и искомым решениям. Представителями стохастического направления в решении некорректных задач являются, в частности, методы статической регуляризации [2] и динамической фильтрации [3], базирующиеся на развитии идеи фильтра Калмана [4]. Однако эти методы можно отнести к стохастическим лишь в узком смысле этого понятия, поскольку они базируются на детерминированных моделях. В силу стохастичности эксперимента очевидно, что все без исключения параметры модели — как физические свойства, температура, так и пространственно-временные (координаты, время) по сути случайны. Если учесть, что измеряемые значения функции и независимые переменные являются реализациями некоторых

© В. В. Панин, Ф. А. Кривошей, Ю. А. Богдан, 2014

случайных процессов, то стохастический подход к решению ОЗ в такой расширенной интерпретации модели представляется адекватным. Стохастическая аппроксимация уравнения теплопереноса базируется на явлении случайных флуктуаций характеризующих его параметров. Известно, что малые отклонения (флуктуации) результатов решения прямой задачи (экспериментальных данных) могут приводить к большим отклонениям искомым решений ОЗ. Именно на факте существенного влияния малых возмущений основана суть подхода: используя случайные флуктуации параметров уравнения теплопереноса, построить метод решения некорректных ОЗ, подавляющий их неустойчивость.

Получим уравнение теплопереноса для осредненных значений случайных функций температуры. Для иллюстрации метода рассмотрим одномерное исходное уравнение теплопроводности

$$c(x, t) \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda(x, t) \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0, \quad (1)$$

$$T(0, x) = T_H, \quad (2)$$

$$\Gamma(T, t) = m_1(t)T'_X + m_2(t)T, \quad (3)$$

где  $T$ ,  $c$ ,  $\lambda$  — соответственно температура, удельная теплоемкость и теплопроводность. Варьируя в граничных условиях коэффициенты  $m_1$ ,  $m_2$ , получаем условие Дирихле ( $m_1 = 0, m_2 > 0$ ), Неймана ( $m_1 > 0, m_2 = 0$ ) или смешанные условия ( $m_1, m_2 > 0$ ). По известным (измеренным) пространственно-временным фрагментам поля  $T(x, t)$  требуется восстановить некоторые из следующих функций:  $c$ ,  $\lambda$ , краевые условия (2), (3). Доказательства существования и единственности пары функций  $c$ ,  $\lambda$  приведены в [5], краевых условий — в [6]. Вследствие стохастичности эксперимента случайной величиной или функцией (процессом) могут быть все параметры, входящие в уравнение (1): случайные величины координат  $x$ , времени  $t$ , случайные поля (или процессы)  $c$ ,  $\lambda$ ,  $T$ .

Представим стохастические параметры в виде суммы осредненного и случайного (флуктуирующего) слагаемых:  $\langle T \rangle + \delta T$ ,  $\langle c \rangle + \delta c$ ,  $\langle \lambda \rangle + \delta(\lambda)$ ,  $\langle X \rangle + \delta x$ ,  $\langle t \rangle + \delta t$ . Последние два можно интерпретировать как случайные ошибки измерений координат или времени. Следовательно, экспериментальное поле  $T(x, t)$  можно рассматривать как случайное, испытывающее воздействие всех параметров. При постановке конкретной ОЗ ситуация иная, здесь выбор стохастического параметра обусловлен постановкой задачи и зависит от искомой функции. В этой ситуации случайная функция  $T$  интерпретируется как результат воздействия на детерминированную функцию одной или двух случайных величин. Остальные параметры считаются детерминированными (“замороженными”). Для пространственно-временного распределения флуктуаций  $\delta T$  хорошим приближением можно полагать гауссовское распределение. Такое приближение широко используется при исследовании турбулентных течений и двухфазных потоков [7, 8]. Если система подверглась некоторому числу случайных независимых воздействий, то допустимо описать ее состояние в терминах средних значений за времена, большие времени “единичного толчка”. Такая физическая ситуация может быть описана в приближении дельта-коррелированного процесса [9].

Пусть в уравнении (1)  $c$ ,  $\lambda$  — случайные  $\delta$ -коррелированные поля со средними значениями  $\langle c \rangle$ ,  $\langle \lambda \rangle$  и корреляционными функциями

$$\langle \delta c(x_1, t_1) \delta c(x_2, t_2) \rangle = B_1(x, t) \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2), \quad (4)$$

$$\langle \delta \lambda(x_1, t_1) \delta \lambda(x_2, t_2) \rangle = B_2(x, t) \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2). \quad (5)$$

Осредним уравнение (1) по реализации случайных полей  $c$ ,  $\lambda$ , имея в виду, что  $c = \langle c \rangle + \delta c$ ,  $\lambda = \langle \lambda \rangle + \delta \lambda$ ,  $T = \langle T \rangle + \delta T$

$$\begin{aligned} \langle c(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \rangle + \left\langle \delta c(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \delta T(x, t) \right\rangle - \frac{\partial}{\partial x} \langle \lambda(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \rangle - \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left\langle \delta \lambda(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \delta T(x, t) \right\rangle = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Задача нахождения замкнутого уравнения для средних значений  $\langle T \rangle$  стохастически не линейна, так как в осредненном уравнении (6) появляются члены типа  $\langle \delta c(\partial \delta T / \partial t) \rangle$ ,  $\langle \delta \lambda(\partial \delta T / \partial x) \rangle$ . Для расщепления этих корреляций воспользуемся формулой Фурутцу–Новикова [10], которая для гауссовских полей в терминах нелинейностей уравнения (6) принимает вид

$$\left\langle \delta c(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \right\rangle = \int d(x, t)' \left\langle \delta c(x, t) \delta(c)(x, t)' \left\langle \frac{\delta}{\delta[\delta c(x, t)']} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \right\rangle \right\rangle, \quad (7)$$

$$\left\langle \delta \lambda(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right\rangle = \int d(x, t)' \left\langle \delta \lambda(x, t) \delta \lambda(x, t)' \left\langle \frac{\delta}{\delta[\delta \lambda(x, t)']} \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right\rangle \right\rangle. \quad (8)$$

Таким образом, задача расщепления сводится к вычислению функциональных производных

$$\left\langle \frac{\delta}{\delta[\delta c(x, t)']} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \left\langle \frac{\delta T(x, t)}{\delta[\delta c(x, t)']} \right\rangle, \quad (9)$$

$$\left\langle \frac{\delta}{\delta[\delta \lambda(x, t)']} \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x} \left\langle \frac{\delta T(x, t)}{\delta[\delta \lambda(x, t)']} \right\rangle. \quad (10)$$

С учетом (4), (5) выражения (7), (8) принимают вид

$$\left\langle \delta c(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \right\rangle = B_1(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \left\langle \frac{\delta T(x, t)}{\delta[\delta c(x, t)']} \right\rangle, \quad (11)$$

$$\left\langle \delta \lambda(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right\rangle = B_2(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \left\langle \frac{\delta T(x, t)}{\delta[\delta \lambda(x, t)']} \right\rangle. \quad (12)$$

Используя для вычисления производных (9), (10) уравнение (1) и условие причинности

$$\frac{\delta T(x, t)}{\delta[\delta c(x, t)]} = 0$$

при  $t' < \tau$  получаем

$$\begin{aligned} \frac{\delta T(x, t)}{\delta[\delta c(x, t, \tau)]} = \int_{\tau}^t \left[ \langle c(x, t)' \rangle^{-1} \nabla \langle \lambda(x, t)' \rangle \nabla T(x, t)' + \langle c(x, t)' \rangle^{-1} \nabla \delta \lambda(x, t)' \nabla T(x, t)' - \right. \\ \left. - \langle c(x, t)' \rangle^{-1} \delta c(x, t)' \frac{\partial T(x, t)'}{\partial t'} \right] \frac{\delta T(x, t)'}{\delta[\delta c(x, \tau)]} dt' - \\ - \int_0^t \langle c(x, t)' \rangle^{-1} \frac{\partial T(x, t)'}{\partial t'} \frac{\delta[\delta c(x, t)']}{\delta[\delta c(x, \tau)]} dt' \end{aligned} \quad (13)$$

Имея в виду определение функциональной производной  $\delta[\delta c(x, t)]/\delta[\delta c(x, \tau)] = \delta(t' - \tau)$  и полагая в (13)  $\tau = t$ , получаем

$$\frac{\delta T(x, t)}{\delta[\delta c(x, t)]} = \langle c(x, t) \rangle^{-1} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t}. \quad (14)$$

Полагая  $\delta\lambda = 0$  и учитывая (11), (14) окончательно получаем

$$\left\langle \delta c(x, t) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \right\rangle = B_1(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \langle c(x, t) \rangle^{-1} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t}. \quad (15)$$

После подстановки выражения (15) в уравнение (6) при  $\delta\lambda = 0$  последнее приобретает замкнутый вид уравнения гиперболического типа

$$\left[ \langle c \rangle \frac{\partial}{\partial t} + B_1(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \left( \langle c \rangle \frac{\partial}{\partial t} - \lambda \Delta \right) \right] \langle T \rangle = 0. \quad (16)$$

Аналогично, полагая  $\delta c = 0$  и вычислив производную  $\delta T/\delta(\delta\lambda)$  из (6), получаем уравнение для средних значений  $\langle T \rangle$

$$\left[ c \frac{\partial}{\partial t} - \langle \lambda \rangle \Delta - B_2(x, t) \Delta^2 \right] \langle T \rangle = 0. \quad (17)$$

Если флуктации  $\delta c$ ,  $\delta\lambda$  описываются гауссовским  $\delta$ -коррелированным процессом, то  $B_1 = \sigma_c^2$ ,  $B_2 = \sigma_\lambda^2$ , т. е. в уравнениях (16), (17) в качестве малых параметров появляются статистические характеристики коэффициентов  $c$ ,  $\lambda$  — их дисперсии. Таким образом ОЗ формулируется как задача восстановления среднего удельного теплового потока на границе или среднего начального распределения температур по средним значениям поля  $\langle T \rangle$ . В частности, уравнение (16) приводит к корректной постановке граничной ОЗ Неймана для теплопроводности в виде интегрального уравнения Вольтерра II рода для средней плотности теплового потока  $\langle q \rangle$

$$\alpha \langle q \rangle - \int_0^t \langle q \rangle dt' = c \int_0^x \langle T \rangle dx', \quad (18)$$

где  $\alpha = \sigma_c^2/\langle c \rangle^2$ . Это уравнение формально эквивалентно уравнению в методе Лаврентьева [11]. Аналогично, уравнение (17), на основе которого задача восстановления среднего начального распределения  $\langle T_H \rangle$  оказывается корректной, формально идентично уравнению в методе квазиобращения [12]. Однако, в отличие от [11, 12], где возникает проблема выбора малых параметров регуляризации, уравнения (16), (17), (18) содержат вполне определенные параметры регуляризации — статистические характеристики коэффициентов  $c$ ,  $\lambda$ .

1. Тихонов А. Н. О некорректно поставленных задачах // Вычислительные методы и программирование. — Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1967. — С. 3–33.
2. Турчин В. Ф., Козлов В. П., Малкевич М. С. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач // Усп. физ. наук. — 1970. — **102**, № 3. — С. 345–386.
3. Мацевитый Ю. М., Лушпенко С. Ф. Идентификация теплофизических свойств твердых тел. — Киев: Наук. думка, 1990. — 216 с.
4. Калман Р., Бьюси Р. Новые результаты в линейной фильтрации и теории предсказания // Тр. америк. об-ва инж.-мех. Сер. Д. — 1961. — **83**, № 1. — С. 123–141.

5. *Клибанов М. В.* Об одном классе обратных задач для нелинейных параболических уравнений // Докл. АН СССР. – 1985. – **280**, № 3. – С. 533–536.
6. *Лаверентьев М. М., Романов В. Г., Шишатский С. П.* Некорректные задачи математической физики и анализа. – Москва: Наука, 1980. – 288 с.
7. *Деревич И. В., Зайчик Л. И.* Уравнение для плотности вероятности скорости и температуры частиц в турбулентном потоке, моделируемом гауссовым случайным полем // Прикл. мех. и мат. – 1990. – **4**, № 5. – С. 767–774.
8. *Кривошей Ф. А.* Стохастическая модель нестационарного потока двухфазной среды // Журн. вычислит. математики и мат. физики. – 1993. – **33**, № 7. – С. 1103–1109.
9. *Кляцкин В. И.* Стохастические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах. – Москва: Наука, 1980. – 335 с.
10. *Новиков Е. А.* Функционалы и метод случайных полей в теории турбулентности // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1964. – **47**, № 6. – С. 1919–1926.
11. *Лаверентьев М. М.* О некорректных задачах математической физики. – Москва: Изд-во АН СССР, 1962. – 250 с.
12. *Латтес Р., Лионс Ж. Л.* Метод квазиобращения и его применения. – Москва: Мир, 1970. – 336 с.

*Киевская государственная академия водного транспорта  
им. гетмана Петра Конашевича-Сагайдачного*

*Поступило в редакцию 25.02.2014*

**В. В. Панін, Ф. О. Кривошей, Ю. О. Богдан**

### **Стохастична регуляризація некоректних задач теплопереносу**

*Стохастична апроксимація параболического рівняння теплопровідності та наступне його осереднення за реалізаціями випадкових параметрів приводить до рівняння гіперболического типу для середніх значень функцій переносу. На основі цього рівняння постановки обернених задач відновлення крайових умов коректні.*

**V. V. Panin, F. A. Krivoshey, Yu. A. Bogdan**

### **Stochastic regularization of ill-posed problems of heat transfer**

*The stochastic approximation of the parabolic equation of heat conduction and its subsequent averaging over realizations of random parameters leads to an equation of the hyperbolic type for the average values of transfer functions. On a basis of this equation, the statements of inverse problems concerning the restoration of boundary conditions are well-posed.*



УДК 550.835

С. Т. Звольський

## Визначення вологості ґрунтів різної щільності радіоізотопними методами

(Представлено членом-кореспондентом НАН України О. Ю. Митропольським)

*Розрахунками та експериментом ідентифіковано адитивну складову швидкості лічби нейтронним вологоміром, зумовлену щільністю скелета ґрунту. З урахуванням її та за даними лабораторних визначень об'ємної вологості та щільності скелета ґрунту проілюстровано побудову єдиної — для всього інтервалу можливих змін щільності скелета ґрунту — градуовальної залежності нейтронного вологоміра. Для інтерпретації свердловинних вимірювань у цій залежності замінено щільність скелета ґрунту на щільність ґрунту природної вологості, яку визначають радіоізотопним щільноміром безпосередньо в досліджуваній свердловині.*

Визначення показників фізичного стану ґрунтів все частіше відбувається за допомогою радіоізотопних методів. Зокрема, вологість ґрунту визначають нейтрон-нейтронним методом за повільними нейтронами (ННМ-п).

У доінверсійній області довжин зонда (відстані від джерела до середини довжини лічильника нейтронів) графічно градуовальні залежності нейтронних вологомірів наближаються до прямої лінії зі зменшенням довжини зонда до нульового значення. Для таких вологомірів (при сталій щільності сухого ґрунту (далі його скелета  $\rho_d$ ), при відсутності хімічно зв'язаного ґрунтом водню (глинистих мінералів і органічної речовини) та при відсутності в ньому аномальних поглиначів теплових нейтронів) існує однозначна залежність між  $I_0$  і  $W_V$  ґрунту:

$$I_0 = f(W_V), \quad (1)$$

де  $I_0$  — швидкість лічби повільних нейтронів, імп/с;  $W_V$  — об'ємна вологість ґрунту, %.

Однак щільність ґрунту не є сталою в його геологічному розрізі. Тут ґрунт однієї й тієї самої вологості може характеризуватися різною щільністю, що приводить до похибок у визначенні його вологості. За даними Р. Olgaard [1], зміна  $\rho_d$  ґрунту на  $0,1 \text{ г/см}^3$  приводить до зміни  $I_0$  на величину, що відповідає зміні вологості (похибки її визначення за повільними нейтронами), яка дорівнює  $0,8\%$  для  $W_V = 5\%$  й  $1,6\%$  для  $W_V = 35\%$ . У діапазоні зміни  $\rho_d$  піщано-глинистих ґрунтів, який частіше становить  $1,3\text{--}1,8 \text{ г/см}^3$ , абсолютна похибка визначення  $W_V$  ґрунту, що зумовлена зміною його щільності, може дорівнювати  $8\%$  і більше.

Для зменшення похибки визначення вологості ґрунту, зумовленої його щільністю, ДСТУ Б В. 2.1–26 : 2009 [2] рекомендує інтерпретацію показань нейтронного вологоміра виконувати за сімейством градууювальних залежностей  $I_0$  від  $W_V$  для значень  $\rho_d$ , що дорівнюють, г/см<sup>3</sup>: 0,9, 1,2, 1,5, 1,8, 2,1. Для кожного значення  $\rho_d$  справджується однозначна залежність (1), яка побудована для щільності максимально наближеної до щільності ґрунту на горизонті визначення його вологості  $W_V$ . Відшукування такої залежності в сімействі градууювальних графіків є складним і трудомістким процесом.

Є інші наближені способи врахування поправки на щільність ґрунту при визначенні його вологості за показаннями нейтронного вологоміра. Наприклад, у роботі [3] запропоновано такий поправковий коефіцієнт на  $\rho_d$  ґрунту до показань нейтронного вологоміра:

$$k = \sqrt{\frac{\bar{\rho}_d}{\rho_d^i}}, \quad (2)$$

де  $\bar{\rho}_d$  — середнє значення  $\rho_d$  ґрунту у вертикальному геологічному розрізі досліджуваної ділянки;  $\rho_d^i$  — щільність сухого ґрунту  $i$ -го шару цієї ділянки.

Суть цього способу полягає в урахуванні відхилення  $\rho_d$   $i$ -го шару від  $\bar{\rho}_d$  у досліджуваному геологічному розрізі, для якої будувалась градууювальна залежність вологоміра (компенсація відхилення).

Відкоригований інтерпретаційний параметр градууювальної залежності  $I(W_V)$  у цьому випадку має вигляд

$$I = I_0 \sqrt{\frac{\bar{\rho}_d}{\rho_d^i}} \quad (3)$$

(тут  $I_0$  — швидкість лічби нейтронів, яку вимірювали вологоміром (показання вологоміра)). Недоліком такого способу [3] є те, що визначення  $\rho_d$ , яке входить до виразу (3), потребує відбирання проб ґрунту із шурфів та лабораторних вимірювань їх щільності. Більш вагомим його недоліком є неоднозначність коефіцієнта  $k$ , визначеного для певного горизонту ґрунту, при різних потужностях досліджуваного шару цього ґрунту і різній його літології.

В роботі [4] удосконалено і розширено застосування способу шляхом заміни в ньому середнього значення  $\rho_d$  для досліджуваної товщі ґрунтів на  $\rho_d = 1$  г/см<sup>3</sup> і заміни при інтерпретації свердловинних вимірювань  $\rho_d$  на природну щільність ґрунту  $\rho$ .

При вимірюваннях вологості ґрунту нейтронним вологоміром на вході вимірювальної системи є ґрунт різної вологості та швидкі нейтрони джерела. Кінцевим результатом складної взаємодії нейтронів джерела з ґрунтом, тобто на виході вимірювальної системи, є швидкість лічби вологоміром повільних нейтронів.

В існуючих розрахункових даних і в наближених способах врахування поправки на щільність ґрунту (при визначенні його вологості нейтронним вологоміром) чітко прослідковується залежність швидкості лічби повільних нейтронів і від вологості ґрунту, і від його щільності [1–4]. Це підтверджують і наші розрахунки швидкості лічби повільних нейтронів  $I_0$  (іпм/с) для приладу вологомір поверхнево-глибинний радіоізотопний (ВПГР-1 [5]) (за програмою CORA, автори В. В. Кулик, Ю. В. Яковлев, Т. М. Гусак, Інститут геофізики ім. С. І. Субботіна НАН України) для піщаного середовища при заданих значеннях його вологості і змінних значеннях щільності (рис. 1).



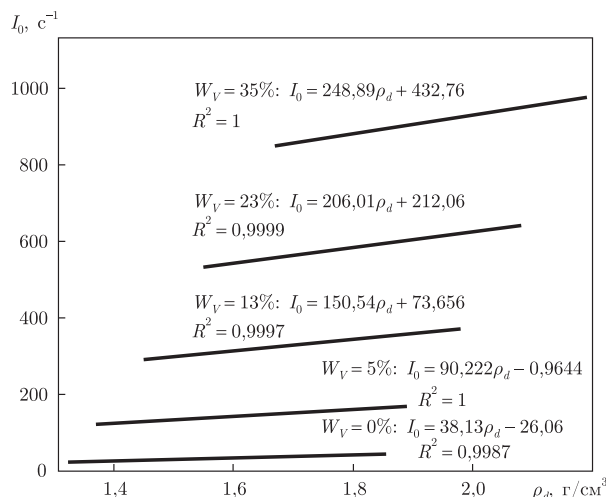


Рис. 1. Залежність приросту швидкості лічби повільних нейтронів, зумовленого щільністю скелета ґрунту при заданій вологості

Швидкість лічби повільних нейтронів у вологому ґрунті, в якому відсутні аномальні поглиначі теплових нейтронів і зв'язаний його мінеральною частиною водень (відсутні глинисті мінерали й органічна речовина), можна навести таким співвідношенням:

$$I_0(W_V, \rho_d) = I(W_V) + I(\rho_d), \quad (4)$$

де  $I(W_V)$  — компонент швидкості лічби, зумовлений вологістю ґрунту  $W_V$ ;  $I(\rho_d)$  — компонент швидкості лічби вологоміра, зумовлений щільністю сухого ґрунту  $\rho_d$  (усереднений ефект збільшення швидкості лічби повільних нейтронів, зумовлений скелетом ґрунту).

Ідентифікація тієї частини швидкості лічби повільних нейтронів, яка спричинена скелетом ґрунту, лягла в основу пропонованого нами врахування адитивної поправки на щільність ґрунту при визначенні його вологості нейтронним вологоміром.

За даними [1] і нашими розрахунками (див. рис. 1) видно, що швидкість лічби вологоміра  $I(\rho_d)$  зумовлена  $\rho_d$  ґрунту при  $W_V = 0\%$  (позначимо її  $I_1(\rho_d)$ ) і складовою  $I_2(\rho_d, W_V)$ , спричиненою посиленням взаємодії нейтронів з мінеральною частиною вологого ґрунту.

Складову швидкості лічби вологоміра, зумовлену  $\rho_d$  ґрунту, можна записати як

$$I(\rho_d) = I_1(\rho_d) + I_2(\rho_d, W_V). \quad (5)$$

Формула (4) набуває такого вигляду:

$$I_0(W_V, \rho_d) = I(W_V) + I_1(\rho_d) + I_2(\rho_d, W_V). \quad (6)$$

Для вологоміра ВПГР-1 [5] (потужність джерела нейтронів  $Q = 4,2 \cdot 10^4 \text{ c}^{-1}$ , детектор нейтронів типу СНМ-17) розрахункову залежність  $I_1(\rho_d)$  від щільності сухого ( $W_V = 0\%$ ) піщаного ґрунту  $\rho_d$  запишемо таким чином:

$$I_1(\rho_d) = 38,13\rho_d - 26,06. \quad (7)$$

Складова  $I_2(\rho_d, W_V)$  залежить і від  $\rho_d$ , і від  $W_V$  ґрунту. Для неї ми встановили, що

$$I_2(\rho_d, W_V) = I_1(\rho_d)B \ln W_V, \quad (8)$$

де  $B$  — стала величина;  $\ln W_V$  — логарифм значення об'ємної вологості.



Із залежностей (4)–(8) для інтерпретаційного параметра маємо:

$$I(W_V) = I_0(W_V, \rho_d) - [I_1(\rho_d) + I_1(\rho_d)B \ln W_V]. \quad (9)$$

Складову у формулі (9) виділено квадратними дужками, вона трансформується в похибку визначення вологості ґрунту нейтронним вологоміром, спричинену щільністю його скелета. Величину множника  $B$  встановлено нами за даними Р. Olgaard [1], а саме: при  $W_V$  ґрунту, що дорівнює 35%, похибка визначення його вологості (що зумовлена  $\rho_d$ ) збільшується у 2 рази в порівнянні з такою при вологості цього ґрунту, яка дорівнює 5%.

Виходячи з цих даних [1] і враховуючи формули (5) й (8), можна записати:

$$\frac{2(I_1 + I_1 B \ln 5)}{S_a} = \frac{I_1 + I_1 B \ln 35}{S_a}, \quad (10)$$

де  $S_a$  — абсолютна чутливість вологоміра до вологості ґрунту, імп/(с · %).

Після спрощень рівняння (10) набуває вигляду

$$B = \frac{1}{\ln 35 - 2 \ln 5}. \quad (11)$$

Множник (коефіцієнт)  $B$  виявився дорівнюючим 0,3.

Оскільки потужність джерела нейтронів, що використовується у конкретному вологомірі, дають з деякою похибкою, потрібно зробити прив'язку (погодження) експериментальної градууювальної залежності вологоміра до розрахункової, виконаної за паспортним значенням потужності джерела.

Прив'язку роблять за складовою  $I_1(\rho_d)$ , яка виміряна в моделі “сухий кварцовий пісок” ( $W_V = 0\%$ ;  $I(W_V) = 0$  імп/с;  $I_2(\rho_d, W_V) = 0$  імп/с;  $I_1(\rho_d) = I_0(\rho_d)$ ). Габарити моделі мають задовольняти умовам глибинності досліджень ґрунту ННМ-п, а діаметр тонкостінної алюмінієвої обсадної труби, що імітує необсаджену свердловину, — діаметру цієї свердловини.

Так, для використаного нами вологоміра швидкість лічби в моделі “сухий кварцовий пісок” ( $\rho_d = 1,57$  г/см<sup>3</sup>;  $W_V = 0,15\%$ ) виявилась дорівнюючою 39 імп/с, з них  $8,2 \cdot 0,15 = 1,23$  імп/с зумовлені вологістю піску (8,2 — абсолютна чутливість використаного вологоміра до вологості ґрунту, імп/(с · %)). Сухим піском створюється швидкість лічби  $39 - 1,23 = 37,8$  імп/с.

Розрахункова швидкість лічби вологоміра (паспортне значення  $Q = 4,2 \cdot 10^4$  с<sup>-1</sup>) у сухому піску  $I_1(\rho_d) = I_0(\rho_d) = 33,8$  імп/с (див. рис. 1). Отже, коефіцієнт погодженості експериментальної градууювальної залежності з розрахунковою  $K_{\Pi} = 37,8 : 33,8 = 1,1175$ .

З урахуванням коефіцієнта погодженості вираз (9) для вологоміра буде таким:

$$I(W_V) = I_0(W_V, \rho_d) - [(42,6\rho_d - 29,1) + (42,6\rho_d - 29,1)B \ln W_V]. \quad (12)$$

Його використовують для побудови єдиної для всього інтервалу можливих змін  $\rho_d$  градууювальної залежності нейтронного вологоміра (рис. 2).

Параметри  $W_V$  й  $\rho_d$  визначають лабораторно. Показання приладу  $I_0(W_V, \rho_d)$  для шару ґрунту із заданими значеннями параметрів  $W_V$  й  $\rho_d$  отримують, використавши свердловинні вимірювання.

Внесення поправки на щільність ґрунту при свердловинних визначеннях його вологості нейтронним вологоміром на основі формули (12), а, по суті, на основі лабораторного визначення  $W_V$  й  $\rho_d$ , трудно здійснене.

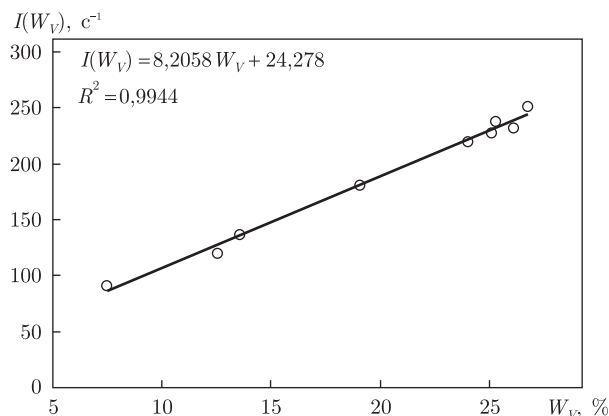


Рис. 2. Градувальна залежність нейтронного вологоміра, що побудована за співвідношенням (12)

Нами трансформовано рівняння (12) до вигляду:

$$I(W_V) = I_0(W_V, \rho_d) - [42,6(\rho - 0,01 \cdot W_V^H \rho_B) - 29,1]K_1 - [42,6(\rho - 0,01 \cdot W_V^H \rho_B) - 29,1]BK_2 \ln W_V^H, \quad (13)$$

де  $\rho$ , г/см<sup>3</sup> — щільність природного ґрунту, що визначена за допомогою гамма-щільноміра;  $\rho_B$ , г/см<sup>3</sup> — щільність прісної води;  $W_V^H$ , % — позірна вологість ґрунту, що визначена за допомогою нейтронного вологоміра за градувальною залежністю  $I(W_V) = f(W_V)$  (12) та його показаннями  $I_0(W_V, \rho_d)$ ;  $K_1$  й  $K_2$  — трансформаційні коефіцієнти.

Оскільки  $W_V^H > W_V$ , множник  $(\rho - 0,01W_V^H \rho_B)$  у виразі (13) менший за  $\rho_d$  ( $\rho_d = \rho - 0,01W_V \rho_B$ ), це веде до деякого зменшення швидкості лічби  $I_0(W_V, \rho_d)$ , що практично повністю компенсується множником  $K_1$ , який визначають із виразу:

$$(42,6\rho_d - 29,1) = [42,6(\rho - 0,01 \cdot W_V^H \rho_B) - 29,1]K_1. \quad (14)$$

З цієї ж причини ( $W_V^H > W_V$ ) множник  $\ln W_V^H > \ln W_V$ , що веде до певного зростання швидкості лічби  $I_0(W_V, \rho_d)$  при одночасному зменшенні її за рахунок множника  $(\rho - 0,01W_V^H \rho_B)$ . Ці зміни  $I_2$  компенсують введенням коефіцієнта  $K_2$ , величину якого визначають із виразу:

$$[42,6(\rho - 0,01 \cdot W_V^H \rho_B) - 29,1]BK_2 \ln W_V^H = (42,6\rho_d - 29,1)B \ln W_V. \quad (15)$$

Нами розраховано коефіцієнти  $K_1$  й  $K_2$  для  $\rho_d$ , що дорівнюють 1,2, 1,4, 1,6 г/см<sup>3</sup>, та  $W_V$  ґрунту — 5, 10, 20, 30, 35%.

Встановлено, що коефіцієнти  $K_1$  й  $K_2$  певною мірою залежать від вологості  $W_V$ , а коефіцієнт  $K_2$  — від щільності ґрунту  $\rho_d$ . У формулі (13) використовують їх середні значення, визначене для діапазону вологості від 10 до 30% і щільності скелета (сухої частини) ґрунту від 1,2 до 1,6 г/см<sup>3</sup>. У наведеному діапазоні значень  $W_V$  й  $\rho_d$  середня величина коефіцієнта  $K_1^c = 1,108$ , а  $K_2^c = 0,988$ .

Було досліджено зміни складових  $I_1(\rho_d)$  і  $I_2(\rho_d, W_V)$  при використанні в залежності (13) замість справжніх значень коефіцієнтів  $K_1$  й  $K_2$  їх середні значення  $K_1^c$  й  $K_2^c$ , а також трансформації цих змін швидкостей лічби в похибки визначення вологості за формулою (12). Похибка  $\Delta W_V(K_1, K_2)$ , що зумовлена заміною в залежності (13) дійсних значень коефіцієнтів  $K_1$  й  $K_2$  на їх середні значення, становила 0,25%.

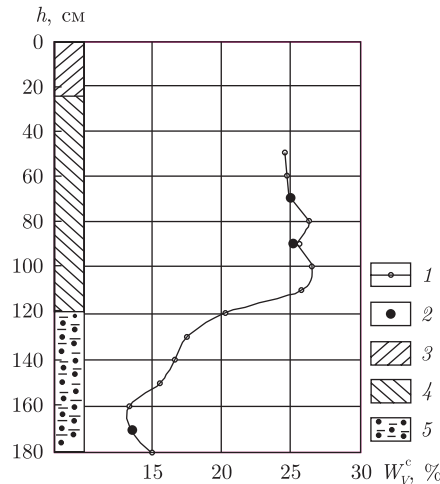


Рис. 3. Розподіл сумарної вологості ґрунту в геологічному розрізі свердловини: 1 — об'ємна вологість ґрунту, що визначена за (13); 2 — вологість ґрунту, що визначена за термоваговим способом; 3 — насипний ґрунт; 4 — важкий супісок; 5 — глинистий пісок

У цілому, похибка визначення вологості ґрунту за інтерпретаційною залежністю (13), замість інтерпретаційної залежності (12), виявилась малою при порівнянні її з припустимою похибкою визначення об'ємної вологості ґрунту радіоізотопними методами ( $\Delta W_V = \pm 2\%$ ). Побудовані за ними градувальні залежності практично збігаються між собою. Це дозволяє побудувати градувальну залежність нейтронного вологоміра за формулою (12), тобто на основі класичних термовагових визначень щільності скелета ґрунту  $\rho_d$  і його вологості  $W_V$ , а інтерпретаційний параметр свердловинних вимірювань  $I(W_V)$  знаходити за співвідношенням (13). Параметр  $\rho$  для досліджуваних шарів ґрунту визначають за допомогою радіоізотопного гамма-гамма-щільноміра (наприклад, типу ППГР-1). Параметр  $W_V^H$  визначають за показаннями нейтронного вологоміра —  $I_0(W_V, \rho_d)$ , скориставшись графіком рис. 2. Розрахований, згідно з залежністю (13), параметр  $I(W_V)$  інтерпретують за вказаним графіком.

Вимірювання вологості ґрунтів різної щільності радіоізотопними методами випробувано на дослідному майданчику Інституту геофізики ім. С. І. Субботіна НАН України. У приповерхневому шарі ґрунти тут складені важким супіском, який з глибини 110 см переходить у пісок. Випробування виконано за допомогою нейтронного вологоміра типу ВПГР-1 у необсаджений свердловині діаметром 50 мм.

Інтерпретацію свердловинних вимірювань вологоміром виконано, згідно з (13). За цим співвідношенням визначали сумарний інтерпретаційний параметр  $[I(W_V^c) = I(W_V) + I(W_V^{x-3})]$ , де  $I(W_V^{x-3})$  — еквівалент хімічно зв'язаної води глинистих мінералів]. Параметр  $W_V^{x-3}$  знаходять за гамма-каротажем (ГК) вимірюванням коефіцієнта глинистості ґрунту та НК вимірюванням його сумарної вологості [6]. При градуванні вологоміра та контрольних вимірюваннях у свердловині  $W_V^{x-3}$  визначають лабораторно (термоваговим способом з дотриманням рекомендацій [2]). Визначені нами лабораторно величини  $W_V^{x-3}$  для важкого супіску дослідного майданчика виявилися дорівнюючими 0,7% об'ємної вологості в інтервалі глибин 50–70 см та 1,5% — в інтервалі глибин 80–100 см. Результати інтерпретації вимірювань на дослідному майданчику демонструє рис. 3, з якого видно, що встановлена нейтронним вологоміром вологість ґрунту збігається з її контрольними вимірюваннями термоваговим способом (за хімічно зв'язаної води глинистих мінералів). Розходження ви-

значень вологості ґрунту нейтронним вологоміром і класичним термоваговим способом не перевищують 1%.

Таким чином, визначення адитивної поправки на щільність ґрунту та заміна  $\rho_d$  на  $\rho$  істотно спрощує інтерпретацію свердловинних радіоізотопних вимірювань вологості, підвищує їх точність та оперативність.

1. *Olgaard P. L.* On the theory of the neutronic method for measuring the water content in soil: Risö Report 97. – Copenhagen, 1965. – 44 p.
2. ДСТУ БВ. 2.1–26:2009. Основи та підвалини будинків і споруд. Ґрунти. Методи радіоізотопного вимірювання щільності і вологості. – Введ. 01.10.2010.
3. *Greacen E. L., Schrale G.* The effect of bulk density on neutron meter calibration // Austral. J. Soil Res. – 1976. – No 14. – P. 159–169.
4. *Кетов А. Ю., Іващенко С. О., Звольський С. Т.* Поправка на щільність ґрунту при визначенні його вологості нейтронними вологомірами // Доп. НАН України. – 2012. – № 3. – С. 118–122.
5. *Техническое описание и инструкция по эксплуатации.* Влагомер поверхностно-глубинный радиоизотопный ВПГР-1. – Полтава: Изд-во Полтава, 1982. – 43 с.
6. *Кулик В., Бондаренко М., Кашуба Г., Стасів О.* Адитивний і мультиплікативний способи врахування глинистості порід при визначенні їх пористості за допомогою нейтронного і акустичного каротажу // Вісн. КНУ ім. Т. Г. Шевченка. Сер. Геологія. – 2008. – Вип. 45. – С. 34–38.

*Інститут геофізики ім. С. І. Субботіна  
НАН України, Київ*

*Надійшло до редакції 23.12.2013*

**С. Т. Звольський**

### **Определение влажности ґрунтов разной плотности радиоизотопными методами**

*Расчетами и экспериментом идентифицирована аддитивная составляющая скорости счета нейтронным влагомером, вызванная плотностью скелета ґрунта. С учетом ее и по данным лабораторных определений объемной влажности и плотности скелета ґрунта проиллюстрировано построение единой — для всего интервала возможных изменений плотности скелета ґрунта — градуировочной зависимости нейтронного влагомера. Для интерпретации скважинных измерений в этой зависимости заменена плотность скелета ґрунта на плотность ґрунта естественной влажности, которую определяют радиоизотопным плотномером непосредственно в исследуемой скважине.*

**S. T. Zvoltsky**

### **Determination of the moisture content of soils with different densities by radioisotope methods**

*By calculations and experimentally, the additive component of the count rate of a neutron moisture meter, which is caused by the soil framework density, is identified. These data and the laboratory data on the bulk moisture and the soil framework density allow the construction of a single calibration curve for a neutron moisture meter in the entire interval of possible variations in the soil framework density. To interpret the results of borehole measurements with this curve, the soil framework density is replaced by the density of soil with a natural moisture, which was determined with a radioisotope density gage directly in a borehole under study.*

Академик НАН Украины А. Е. Лукин, И. И. Самойленко

## О дисперсных самородно-металлических частицах в черносланцевых формациях эвксинского типа — мегаловушках природного газа

*Черные сланцы — эвксениты, которые являются специфическим литогеодинимическим индикатором отложений задуговых бассейнов, «заражены» разнообразными по химическому составу, форме и структуре самородно-металлическими микро- и наночастицами — трассерами (супер)глубинных флюидов.*

Все известные в настоящее время на Северо-Американском континенте плеи и месторождения сланцевого газа (СГ) связаны с разновозрастными (ордовик — олигоцен) черносланцевыми и терригенно-черносланцевыми толщами, основным литогеодинимическим типом (и индикатором) в составе которых являются эвксениты [1]. Это характерные по очертаниям в плане (неправильно округлые, овалоподобные и т. п.), асимметричные по распределению толщин формации, площадь которых варьирует от менее 5 до более 30 тыс. км<sup>2</sup>, а мощности — от десятков до сотен — первых тысяч метров. Они эшелонированы вдоль континентальных окраин, представляя собой в геоморфологическом и тектоногеодинимическом отношениях котловинообразные, относительно глубоководные задуговые палеобассейны эвксинского типа с признаками интенсивных сопряженных процессов газоотдачи морского дна, газогидратообразования и сероводородного заражения [2–4]. Аномально высокая газоотдача дна бассейнов такого типа, хорошо изученная в Черном море [3], связана с интенсивной глубинной дегазацией, которая осуществляется через систему элементарных очагов разгрузки. Ее интенсивность определяется, таким образом, их количеством и дебитом. В пределах каждого из них фильтрационная (струйная) миграция сочетается с диффузионной, причем диффузионный столбообразный поток “вмещает” одну или несколько газовых струй [3, 4]. При большой плотности элементарных очагов разгрузки и соответствующих соотношениях струйных дебитов с гидрологическим режимом диффузионные потоки сливаются, что способствует гидратообразованию на обширных участках. Процессы их разрушения сульфатредуцирующими бактериями являются важным фактором накопления органического вещества и дисульфидов железа, во многом определяя основные особенности минерального состава и геохимии черных сланцев (ЧС) эвксинского типа — литогеодинимического индикатора “ситовой” (“рассеянный спрединг”) проницаемости морского дна [1]. Наряду с указанными особенностями формы и морфологии эвксинских черносланцевых формаций, это хорошо сочетается с принадлежностью типичных (палео)бассейнов эвксинского типа к задуговым морям (малым океаническим бассейнам), расположенным с внутренней (тыловой) стороны островной дуги и ограниченным задуговым хребтом (остаточной дугой) или континентом [5]. При этом в тылу островных дуг может выделяться несколько генераций таких палеобассейнов. Именно они, в силу своей литогеодинимической природы и тектонической позиции, особенностей строения, литологии и геохимии, благо-

даря последующей гидрофобизации (при трансформации: сапропелевые илы → горючие сланцы → ЧС) играют роль мегаловушек СТ [2].

Механизмы формирования задуговых бассейнов (окраинных морей или малых океанов) и соответственно природа задугового растяжения — причины “рассеянного спрединга” — важнейшего фактора формирования эвксенитов как литогеодинамического типа [1] могут быть различны: рифтогенез, pull-apart, дегидратация субдущирующей плиты с образованием мантийного диапира, возникновение вторичных конвективных ячеек в надсубдукционном клине [5]. По-видимому, универсального механизма нет и для различных тектонических условий справедлива та или иная геодинамическая модель задугового асимметрично-глубоководного бассейна, газовый режим которого в значительной мере обусловлен процессами глубинной дегазации.

Именно в таких условиях накапливались олигоценовые (менилитовая серия Карпатского региона, майкопская серия Кубано-Черноморской области), меловые (спасская и шипотская свиты Карпат), визейские (рудовские слои центральной части Днепровско-Донецкой впадины и их аналоги в Придобруджинском прогибе), верхнепротерозойские, нижнепалеозойские (Львовский прогиб) и другие, перспективные на СТ черносланцевые формации Украины [6, 7]. В связи с этим особый интерес представляет присутствие в указанных ЧС разнообразных по вещественному составу и морфологии частиц самородных металлов, их природных сплавов и интерметаллидов — трассеров глубинных безводных флюидов (сверхсжатых поликомпонентных газов на водородно-углеводородной основе), с последующей физико-геохимической конверсией которых связано появление гидротермальных растворов [8, 9].

**Менилитовые сланцы Карпатского региона** — один из наиболее известных в мире литотипов ЧС (первоначально горючих сланцев с очень высоким содержанием органического вещества смешанного гумусово-сапропелевого типа). Оligоценовая (по мнению некоторых стратиграфов, олигоцен-нижнемиоценовая) менилитовая серия (свита) Карпат и внутренней зоны Предкарпатского прогиба, входящая в состав карпатского флиша, является ярким примером черносланцевой формации эвксинского типа. Это флишобидно-флишевый парагенез преобладающих ЧС в тонком переслаивании с песчано-алевро-ритмитовыми турбидитами (к песчаникам, алевролитам и черносланцево-терригенным ритмитам приурочено большое количество нефтяных и газовых залежей 25 месторождений). Обилие фрамбоидального пирита, высокое содержание  $S_{org}$  в керогене и его преимущественно микробиогенная природа, признаки присутствия былых метаногидратов, палеонтологические и фациально-палеоэкологические особенности (отсутствие бентоса, разнообразная ихтиофауна, включая остатки глубоководных светящихся рыб) свидетельствуют о накоплении менилитовой формации в условиях глубоководного бассейна с интенсивным сероводородным заражением придонных вод, что подтверждается характером распределения ее толщин и особенностями строения. Совокупность литогеодинамических и палеотектонических признаков позволяет рассматривать менилитовую формацию как эвксинский палеобассейн задугового типа. Данные сканирующей электронной микроскопии (с энергодисперсионной приставкой) и рентгеноструктурного анализа (дифрактометр ДРОН-3)\* свидетельствуют об интенсивной “зараженности” менилитовых сланцев дисперсными самородно-металлическими частицами (ДСМЧ), включая сидерофильные (Fe, Ni, Cr, Ti), халькофильные (Сb, Pb, Zn и др.), литофильные (Sn, Al и др.) металлы, их разнообразные природные сплавы

---

\*Методика исследования и принципы интерпретации их результатов охарактеризованы в [8, 9].



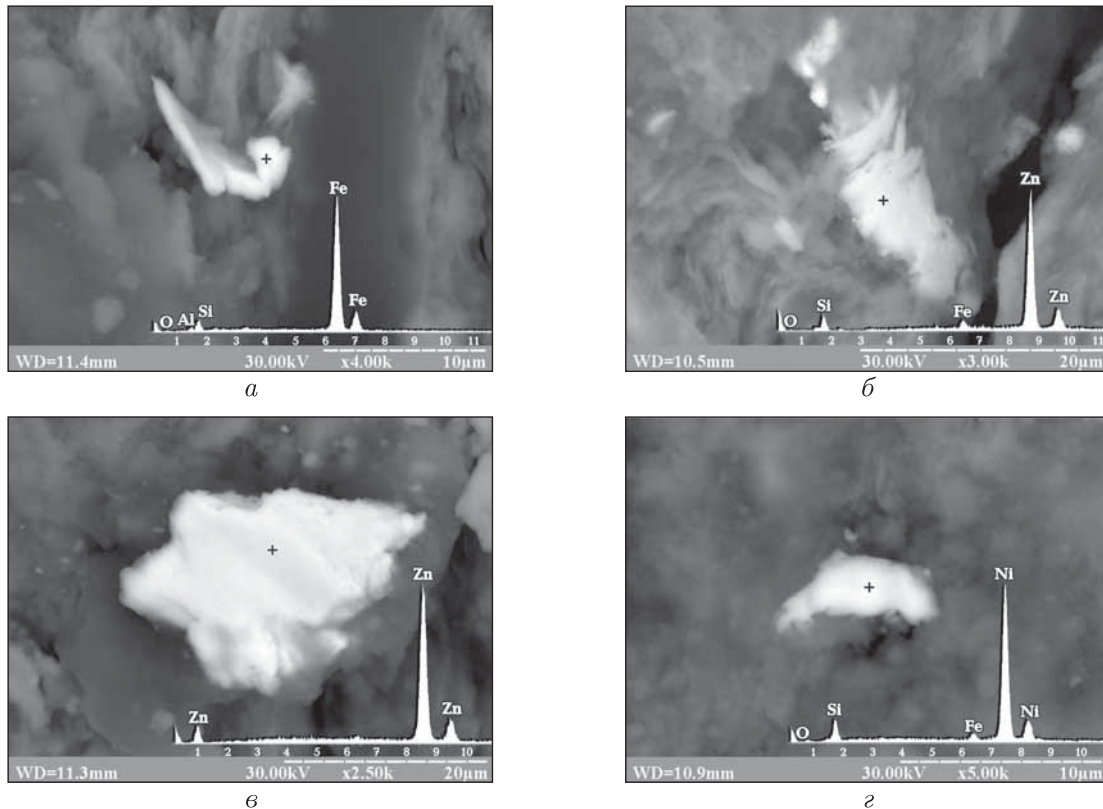


Рис. 1. Дисперсные самородно-металлические частицы в менилитовых сланцах (с. Синевидное): а — самородное железо; б — самородный цинк (с примесью железа); в — самородный цинк; г — самородный никель (с примесью железа)

и интерметаллиды. Даже весьма ограниченное количество иллюстраций достаточно убедительно свидетельствует о разнообразии химического состава, формы и морфологии ДСМЧ (рис. 1).

**Верхнепротерозойские — нижнепалеозойские ЧС Вольно-Подолли** (тектонически гетерогенного краевого сегмента юго-западной окраины Восточно-Европейской платформы, расположенного между Карпатами и Украинским щитом) представлены системой разновозрастных эвксинских задуговых палеобассейнов [2]. Это черносланцевые формации венда, кембрия, силура, нижнего девона Львовского и Предкарпатского, а также Придобруджинского прогиба. Все они характеризуются сходной ассоциацией ДСМЧ, показанной здесь на примере силурийских ЧС Львовского прогиба. Наблюдается их большое химическое разнообразие, включая золото, никель, железо с разнообразными примесями, хром, интерметаллиды Fe : Cr и Fe : Ni, цинк, его сплавы с медью, свинцом, оловом и т. д. (рис. 2).

Отмечен ранее установленный на других объектах [8, 9] феномен сочетания для некоторых халько- и оксифильных металлов самородной, сульфидной и окисной форм в одной и той же “точечной” пробе, что, в частности, характерно для цинка (см. г на рис. 2). Присутствие цинкита ZnO (наряду с самородным цинком и сфалеритом (пришибрамитом) в этой ассоциации) установлено по данным рентгеноструктурного анализа. Такие неравновесные ассоциации образуются в момент указанной конверсии безводных резко восстановительных флюидов в углекислые и сероводородные гидротермальные растворы.

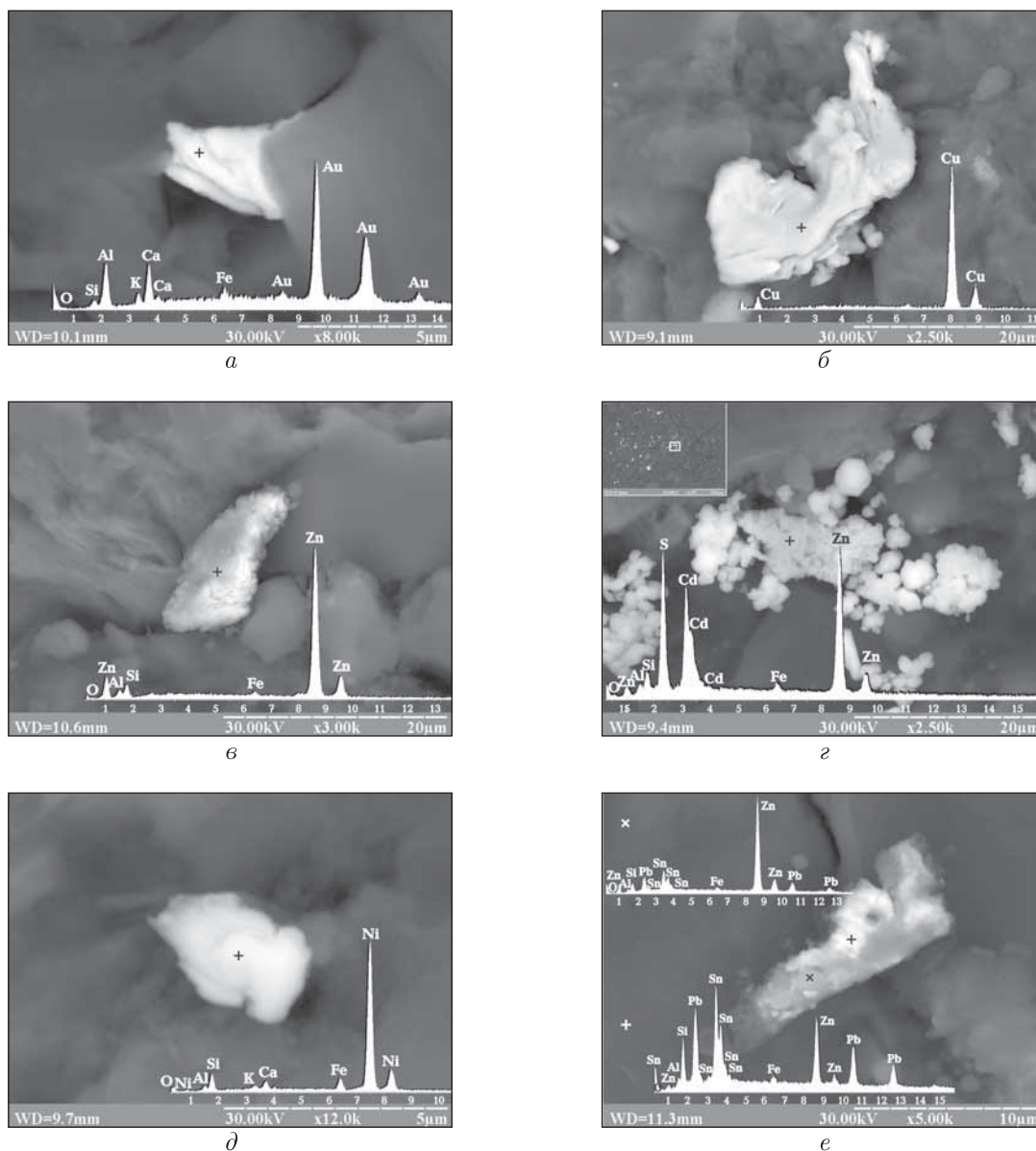


Рис. 2. Дисперсные самородно-металлические частицы в силурийских черных сланцах Львовского прогиба: *a* — золото (Великомостовская скв. 30, 3867–3873 м); *б* — медь (Великомостовская скв. 30, 3867–3873 м); *в* — цинк (с примесью железа) (Великомостовская скв. 30, 4017–4025 м); *г* — ассоциация самородного цинка с кадмийсодержащим сфалеритом (пришибрамитом) (Великомостовская скв. 30, 4017–4025 м); *д* — никель с примесью железа (Глинянская скв. 1, 2334–2339 м); *е* — агрегат частиц природного сплава цинка, свинца и олова с различными соотношениями указанных металлов и примесью железа (Добротворская скв. 1, 3216–3221 м)

**Майкопская серия Азово-Черноморского региона** (рис. 3) наряду с менилитовой формацией является наиболее ярким проявлением глобального аноксического события в олигоцене. Это мощная (до 3 км) флишобидная терригенно-черносланцевая формация. Специфическая биота (обилие ихтиодетрита, планктонные фораминиферы, спиккулы губок), обилие фрамбоидального пирита, контуритовая и турбидитовая природа алевроито-песча-



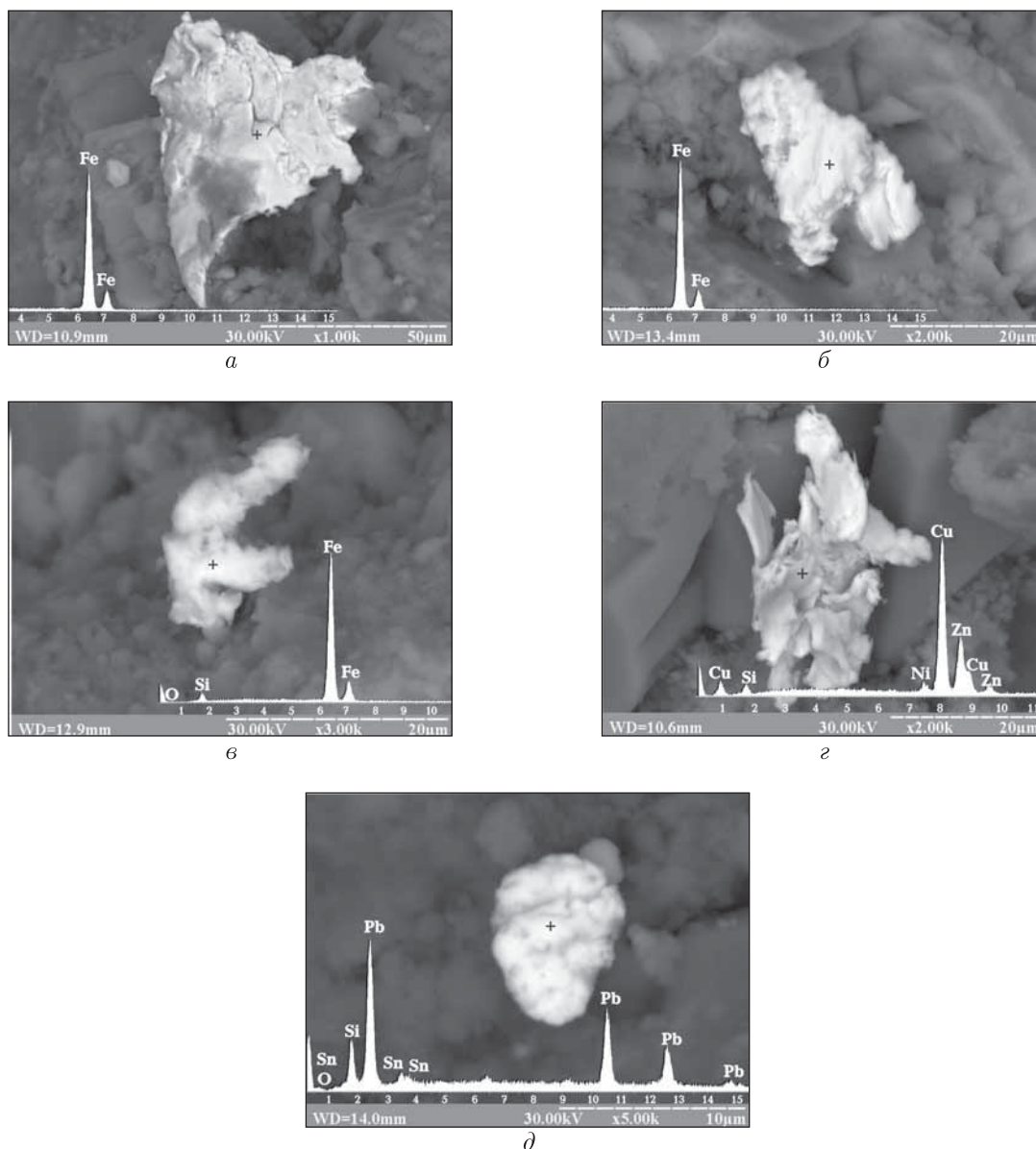


Рис. 3. Дисперсные самородно-металлические частицы в майкопских черных сланцах Прикерченского шельфа (месторождение Субботина): *а, б, в* — самородное железо (*а* — скв. 1, 2500–2506 м; *б* — скв. 1, 2498–2503 м; *в* — скв. 403, 2439–2444 м); *г* — цинкистая медь (природная латунь) с примесью никеля (скв. 1, 2490–2495 м); *д* — свинец с примесью олова (скв. 403, 2591–2596 м)

ных и ритмитовых пачек свидетельствуют о накоплении в условиях задугового котловинообразного бассейна эвксинского типа [10]. Разнообразные окрашенные (темно-серые, черные, зеленовато-серые, бурые) глинистые породы в различной степени обогащены органическим веществом гумусово-сапропелевого типа ( $C_{орг}$  0,8–8,5%). Наряду с сероцветными глинами (аргиллитами) здесь широко распространены ЧС, слагающие пачки до 50–70 м в дюрменской и нижнекерлеутской свитах. Роль ЧС и терригенно-черносланцевых ритмитов возрастает на Прикерченском шельфе [10]. Самородно-металлические микро- и нановключения

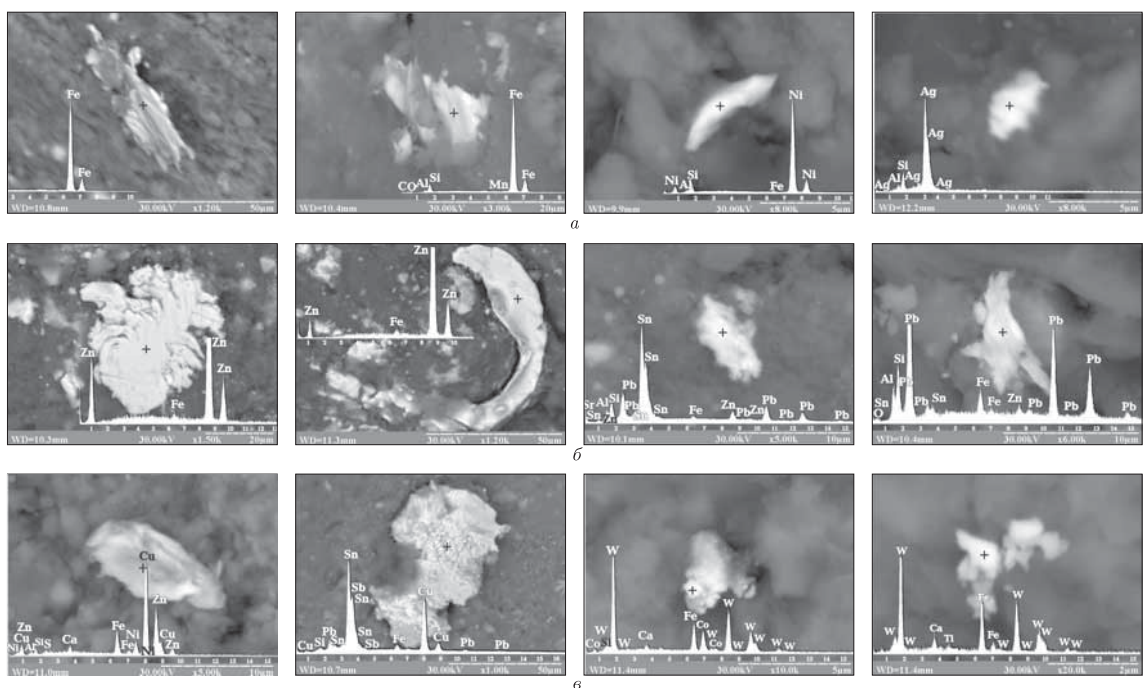


Рис. 4. Дисперсні самородно-металічні частинки в візейських чорних сланцях центральної частини Дніпровсько-Донецької впадини: *а* — частинки самородного заліза, нікеля, срібла (Свиридовська скв. 5, 5830–5842 м); *б* — частинки цинка, олова і їх сросток (Бельська скв. 470, 4666–4674 м); *в* — частинки природних сплавів міді і цинка з примісью заліза і нікеля (латунь-бронза); олова і міді (бронза); вольфрама — заліза — кобальта; вольфрама — заліза — титана (Божковська скв. 1, 5056–5063 м)

представлены здесь достаточно полно и разнообразно как в химическом, так и в морфологическом отношении. Наряду с самородным железом (см. *a–в* на рис. 3) и другими металлами отмечены великолепные пластинчатые сростки природной латуни (см. *з*), сплав свинца с оловом (см. *д*), другие сплавы и интерметаллиды.

**Средневизейская (XIIa микрофаунистический горизонт, рудовские слои) терригенно-черносланцевая формация центральной части Днепровско-Донецкой впадины и Придобруджинского прогиба** представляет собой фрагменты единого эвксинского палеобассейна [11]. В пределах центральной части Днепровско-Донецкой впадины (Сребненская депрессия — Свиридовско-Краснозаводская седловина — Ждановская депрессия и др.) в алеврито-песчаных коллекторах (выносы рек, мутьевые потоки, контурные течения) терригенно-черносланцевой депрессионной толщи (до 1000 м) открыт ряд газоконденсатных и нефтяных залежей. ЧС характеризуются широкими вариациями соотношений керогена с глинистым, кремнеземным, карбонатным, фосфатным и дисульфидно-железистым (обилие фрамбоидального пирита) веществом, структурным и текстурным разнообразием. Содержание гумусово-сапропелевого органического вещества 2,5–16% ( $C_{орг}$  1,5–8%). Как и в ЧС других формаций, здесь наблюдается та же химическая и морфологическая разнообразная ассоциация ДСМЧ, включая различные металлы (относительно чистые и с примесями широкого количественного и качественного диапазона) (*a, б* на рис. 4), природные сплавы и интерметаллиды (см. *в, з*).

Таким образом, ЧС-эвксениты, которые, как отмечалось, являются специфическим литогеодинимическим индикатором “рассеянного спрединга” и “ситовой проницаемости дна” [1, с. 52], характеризуются: 1) аномальной геохимической ассоциацией ДСМЧ (сидеро-, халько- и литофильные металлы); 2) большой ролью среди них разнообразных интерметаллидов и природных сплавов, включая поликомпонентные. Это, с одной стороны, является независимым подтверждением их накопления в задуговых бассейнах (back-arc basins). С другой — это свидетельствует о том, что необходимое для формирования этих бассейнов задуговое растяжение обусловлено мантийным диапиризмом, инициируемым трансрегиональными сдвиговыми дислокациями (формирование структур pull-apart как зародыша задугового бассейна) с последующим подключением других указанных выше механизмов. Наличие ДСМЧ и, в частности, микро- и нановключений оксифильных металлов в черносланцевых эвксенитах свидетельствует об участии в черносланцевом литогенезе (супер)глубинных безводных флюидов типа поликомпонентных сверхсжатых газов на водородно-углеводородной основе, которые создают резко восстановительную среду и являются наряду с катагенезом фактором гидрофобизации пород (терригенно-) черносланцевых формаций. Это инициирует включение капиллярного насоса (“накачка” метана и других углеводородов в гидрофобный коллектор), вследствие чего именно палеобассейны эвксинского типа превращаются в мегаловушки сланцевого и центрально-бассейнового газа [2]. Соответствующие формационные тела большого стратиграфического диапазона (верхний протерозой — кайнозой) пользуются в недрах Украины широким распространением. Как уже отмечалось [2], они могут рассматриваться и как мегаловушки для гелия. Причем, наряду с радиогенным  $^4\text{He}$ , здесь следует ожидать накопление и мантийного  $^3\text{He}$ , о чем свидетельствует интенсивная “зараженность” черносланцевых эвксенитов частицами самородных металлов, природных сплавов и интерметаллидов — трассеров (супер)глубинных флюидов.

1. *Лукин А. Е.* Литогеодинимические факторы нефтегазоаккумуляции в авлакогенных бассейнах. — Киев: Наук. думка, 1997. — 224 с.

2. *Лукин А. Е.* Черносланцевые формации эвксинского типа – мегаловушки природного газа // Геология и полезн. ископаемые Мирового океана. – 2013. – № 4. – С. 5–28.
3. *Шнюков Е. Ф., Старостенко В. И., Гожик П. Ф. и др.* О повышенной газоотдаче дна Черного моря // Геол. журн. – 2001. – № 4. – С. 7–14.
4. *Лукин А. Е.* Роль газогидратообразования в формировании нефтегазоносных бассейнов // Геодинамика, тектоника и флюидодинамика нефтегазоносных регионов Украины: Сб. докл. VII Междунар. конф. “Крым-2007”. – Симферополь: Б. и., 2008. – С. 16–50.
5. *Задуговой бассейн* // Планета Земля. Энциклопедический справочник. – Ст. Петербург: Б. и., 2004. – С. 285–286.
6. *Лукин А. Е.* Сланцевый газ и перспективы его добычи в Украине. Ст. 2. Черносланцевые комплексы Украины и перспективы их газоносности в Волыно-Подоллии и Северо-Западном Причерноморье // Геол. журн. – 2010. – № 4. – С. 7–24.
7. *Лукин А. Е.* Перспективы сланцевой газоносности Днепровско-Донецкого авлакогена // Там же. – 2011. – № 1. – С. 21–41.
8. *Лукин А. Е.* Самородно-металлические микро- и нановключения в формациях нефтегазоносных бассейнов – трассеры суперглубинных флюидов // Геофиз. журн. – 2009. – **31**, № 2. – С. 61–92.
9. *Лукин А. Е.* Самородные металлы и карбиды – показатели состава глубинных геосфер // Геол. журн. – 2006. – № 4. – С. 17–46.
10. *Лукин А. Е.* О перспективах нефтегазоносности Прикерченского шельфа // Там же. – 2008. – № 2. – С. 7–20.
11. *Лукин А. Е.* О Днепровско-Донецком средневизейском палеобассейне эвксинского типа // Докл. АН. – 1995. – **344**, № 5. – С. 660–664.

*Институт геологических наук НАН Украины, Киев*

*Поступило в редакцию 06.02.2014*

Академік НАН України **А. Ю. Лукін, І. І. Самойленко**

### **Про дисперсні самородно-металічні частинки в чорносланцевих формаціях евксинського типу — мегапастках природного газу**

*Чорні сланці — евксеніти, що є специфічними літогеодинамічними індикаторами відкладів задугових басейнів, «заражені» різноманітними за хімічним складом, формою та структурою самородно-металічними мікро- і наночастинками — трасерами (супер)глибинних флюїдів.*

Academician of the NAS of Ukraine **A. E. Lukin, I. I. Samoylenko**

### **On dispersed native metal particles in black shales of the euxinic type — megatraps of natural gas**

*Black shales — euxinites (specific lithogeodynamic indicators of deposits of back-arc basins) are contaminated with chemically and morphologically different dispersed native-metallic micro- and nanoparticles — the trassers of (super)deep fluids.*

Член-корреспондент НАН Украины А. Б. Полонский, И. А. Кибальчич

## Межгодовая изменчивость циркуляции атмосферы и аномалии температуры Восточной Европы в зимний период

*По данным ре-анализа NCEP и стандартных метеорологических наблюдений за 1950–2012 гг. показано, что максимальное влияние на зимние аномалии среднемесячной температуры воздуха в северо-западной части Восточной Европы оказывает Северо-атлантическое колебание, а в восточной части — Скандинавское колебание. Типичные аномалии среднемесячной температуры, обусловленные этими модами, достигают 4–5 °С. В Черноморском регионе преобладает влияние Восточно-атлантического и Восточно-атлантического/Западно-российского колебаний. Обусловленные ими среднемесячные аномалии температуры воздуха достигают здесь 2–2,5 °С. Положительные фазы Североатлантического и Восточно-атлантического колебаний сопровождаются положительными аномалиями приземной температуры на большей части Восточной Европы, а Скандинавского и Восточно-атлантического/Западно-российского колебаний — отрицательными. Экстремально низкие аномалии температуры чаще всего отмечаются при совпадении отрицательной фазы Восточно-атлантического колебания и положительной фазы Скандинавского колебания, а экстремально высокие — при сочетании положительной и отрицательной фаз Восточно-атлантического и Скандинавского колебаний соответственно.*

Вариаций различных параметров системы океан — атмосфера с типичными периодичностями от 2 до 10 лет представляют собой один из основных объектов исследования, поскольку они определяют межгодовую изменчивость гидрометеорологических полей на глобальном и региональном масштабах [1, 2]. В течение последних нескольких десятилетий в Северном полушарии было выделено несколько мод такой низкочастотной изменчивости. Показано, что эти моды через связанные с ними волны Россби, изменения режима циклогенеза и антициклонического блокирования оказывают удаленное влияние на климат в определенных районах Евразии, Северной Америки и Гренландии. В качестве меры изменчивости таких мод обычно используют циркуляционные индексы, которые рассчитываются на основании разложения полей давления (или геопотенциала) на эмпирические ортогональные функции (ЭОФ). Для выделения главных компонент обычно привлекаются поля приземного давления или поля высот геопотенциала на уровнях 1000, 700 и 500 гПа [2–7].

Авторы работы [2] выполнили процедуру разложения полей геопотенциала на уровне 500 гПа, полученных по ежемесячным архивным данным для Северного полушария с начала 20 ст., на ЭОФы. Они выделили несколько устойчивых мод, проявляющиеся в поле давления во внетропических широтах. Основные из них следующие: Североатлантическое колебание (САК); Восточно-атлантическое колебание (ВАК); Скандинавское колебание (СК); Восточно-атлантическое/Западно-российское (ВАЗР) колебание.

Отметим, что все эти моды приурочены к Атлантико-Европейскому региону и проявляются в региональных полях основных гидрометеорологических элементов. В настоящей



работе мы рассмотрим структуру и особенности этих климатических сигналов в поле зимней температуры (в период с декабря по март) для территории Восточной Европы и Причерноморья. Анализ проводился для холодного периода, поскольку удаленные связи выражены в это время наиболее четко [6, 8–10].

Из перечисленных мод САК, описывающее интенсивность зональной циркуляции атмосферы, исследовано наиболее подробно. Это колебание проявляется как первая главная компонента в поле геопотенциала нижней и средней тропосферы Северного полушария в зимний период. Поэтому в качестве индекса САК в настоящее время обычно используется временной коэффициент при соответствующей пространственной моде, полученный в результате разложения поля давления (или геопотенциала) на ЭОФы [1–6, 8–10].

Другая мода в поле геопотенциала Северного полушария, характеризующая интенсивность зональной циркуляции, получила название ВАК. Это колебание также наиболее выражено в зимний период, хотя оно и проявляется в поля давления Атлантико-Европейского региона во все сезоны. По аналогии с САК пространственная структура ВАК представлена диполем в поле геопотенциала Северной Атлантики. Однако центры ВАК смещены на юго-восток по отношению к центрам САК. По этой причине ВАК иногда интерпретируется как “сдвинутый на юг” режим САК. Временная структура колебания характеризуется индексом ВАК, который представлен соответствующим временным коэффициентом в разложении поля давления на ЭОФ.

Совместное влияние САК и ВАК на режим некоторых гидрометеорологических полей Евразии исследовано в работах [11, 12]. В них показано, что эти два колебания в целом описывают изменчивость интенсивности зональной циркуляции в Европейском регионе. Сочетание определенных фаз САК и ВАК сопровождается максимальными термическими аномалиями в этом регионе.

СК вначале было названо Барнстоном и Ливзи первой Евразийской модой (или модой Евразия-1, см. [2]). Позднее, в связи с расположением главного центра в пространственной структуре соответствующей ЭОФ в разложении поля геопотенциала над Скандинавским полуостровом, она была переименована в СК. Положительная фаза колебания связана с положительными аномалиями высоты геопотенциала в средней тропосфере, что отражает наличие блокирующих антициклонов над Скандинавским полуостровом и Европейской территорией России (ЕТР). Во время отрицательной фазы СК на среднемесячных картах АТ-700 и АТ-500 выделяется область отрицательных аномалий в значениях высоты геопотенциала. В течение положительной фазы (т. е. при развитии блокинга) в зимний период фиксируются отрицательные аномалии приземной температуры в Центральной России, а также в Западной Европе. Из-за развития блокинга полярная ветвь струйного течения в Северной Атлантике смещается в северо-восточном направлении относительно своего среднего положения, а в районе Средиземноморья усиливается западный перенос [13].

ВАЗР колебание вначале получило название второй Евразийской (или моды Евразия-2, см. [2]). В пространственной структуре этого колебания выделяется 2 главных центра: в Восточной Атлантике — Западной Европе и в окрестности северной части Каспийского моря. Поэтому в дальнейшем оно было переименовано в ВАЗР колебание. Несмотря на то что устойчивые центры этой моды выделяются в течение всего года, наиболее активны они в зимний период [14]. Положительная фаза ВАЗР колебания связана с положительными аномалиями высоты геопотенциала в средней тропосфере над Европой и Северным Китаем и отрицательными аномалиями над Северной Атлантикой и севером Каспийского моря. При этом зафиксированы положительные аномалии приземной температуры воздуха в районе

восточной Азии и отрицательные аномалии над большей частью Западной России, а также над северо-востоком Африки. Таким образом, положительная фаза ВАЗР колебания характеризует условия антициклонического блокирования ЕТР.

С учетом полученных ранее результатов, следует ожидать в целом положительных аномалий приземной температуры в Восточной Европе в период положительной фазы САК и ВАК и при отрицательной фазе СК и ВАЗР колебания. Величина и пространственная структура этих аномалий определяются не только атмосферным циркуляционным режимом, но и пространственно-временными особенностями анализируемых данных, к описанию которых мы и переходим.

В работе использовались следующие данные с декабря по март:

данные ре-анализа NCEP/NCAR (Национального центра по атмосферным исследованиям США) о среднемесячной температуре воздуха в узлах регулярной сетки за период 1950–2012 гг. для региона, ограниченного координатами: 20–45° в. д. и 55–40° с. ш.;

набор климатических индексов за тот же период, представленный Центром климатических прогнозов США, а именно: *индекс САК* (определяется по первой составляющей разложения ЭОФ поля давления на уровне моря для Северного полушария (20–90° с. ш.)). Значения индекса нормализуются относительно базового периода 1979–2000 гг.; *индексы ВАК, СК и ВАЗР колебания* (рассчитываются в результате анализа ЭОФ изобарической поверхности 700 гПа в Северном полушарии). Значения индексов нормализуются относительно базового периода 1981–2010 гг.;

данные стандартных наблюдений за январь–февраль 1950–2012 гг. на 12 гидрометеорологических (г/м) станциях, расположенных в границах рассматриваемого региона (в городах Варшава, Волгоград, Кишинев, Минск, Ровно, Ростов-на-Дону, Симферополь, София, Тбилиси, Тула, Ужгород, Харьков).

В качестве основного метода статистической обработки исходных данных в настоящей работе был выбран *композиционный анализ*. Благодаря данной методике можно выделить “чистый” сигнал, отвечающий влиянию каждой отдельной ортогональной моды изменчивости на температурный режим Восточной Европы и Причерноморья.

Процедура получения сигнала для каждого индекса и месяца на основе разностных композитов заключается в следующем. Проводится выборка аномальных лет, в которые значение индекса превышает среднее значение как минимум на одно среднее квадратическое отклонение — СКО ( $\sigma$ ), или, наоборот, оказывается меньше среднего на  $1\sigma$ . Таким образом, мы получаем две выборки лет со значениями индекса выше и ниже заданных пределов. Для выбранных лет определяем среднемесячные значения температуры воздуха в каждом узле регулярной сетки по данным ре-анализа. Для сформированных выборок температуры находим среднее значение и СКО. На заключительном этапе получаем “чистый” сигнал посредством определения разности между средними по выборкам для каждого узла сетки (так называемый разностный композит). Наконец, определяется статистическая значимость полученных сигналов (на уровне 90 и 95%).

Для анализа связи экстремальных температурных аномалий в рассматриваемом регионе с циркуляционным атмосферным режимом для каждой из 12 перечисленных выше г/м станций выбирались месяцы с максимальными (по абсолютной величине) положительными и отрицательными аномалиями приземной температуры. Для каждого такого месяца выбирались значения индексов всех 4-х анализируемых колебаний и определялось наиболее часто наблюдаемое сочетание их фаз, благоприятствующее развитию экстремальных аномалий в окрестности каждой г/м станции.

Перейдем к анализу результатов расчетов по каждому из четырех колебательных режимов.

**Североатлантическое колебание.** Несмотря на то, что данное колебание является основным в Атлантико-Европейском регионе в зимний период, его влияние на температурный режим Восточноевропейского региона существенно меняется от месяца к месяцу. Так, в декабре и марте влияние САК на значительную часть исследуемой территории оказалось не очень существенным. Максимальные значения разностного композита не превышают 3,0–3,5 °С. Они наблюдаются в северо-западных регионах Белоруссии. В юго-восточном направлении эти величины постепенно уменьшаются. Нулевая изолиния в эти месяцы проходит через восточную часть Черного моря, Кубань и низовья Волги. Далее на юго-восток от указанной линии знак композита меняется на противоположный, однако его абсолютное численное значение остается весьма низким. Таким образом, типичные среднемесячные аномалии температуры (определяемые как половина величины разностного композита), обусловленные САК, колеблются в эти месяцы в пределах 0–1,5 °С.

Иная ситуация складывается в январе и феврале. Как видно из рис. 1, сигнал САК существенно интенсивнее, чем в декабре и марте. Максимум в районе Прибалтики и на северо-востоке Белоруссии и в Польше достигает 7,0–8,0 °С. Кроме этого, поля композитов характеризуются большей однородностью по сравнению с декабрем и мартом. Величина разностного композита монотонно уменьшается в южном и юго-восточном направлениях. Нулевая изолиния проходит через Черное море с юго-запада на северо-восток. Следовательно, влиянию САК больше всего подвержены Белоруссия, Польша и страны Прибалтики. Типичные среднемесячные аномалии температуры в январе-феврале достигают здесь 3,5–4 °С.

В целом, полученные результаты не противоречат опубликованным данным [8–10]. Как показывают результаты анализа характеристик циклонов, полученных в результате обработки данных ре-анализа в работе [15], описанное распределение аномалий приземной температуры главным образом определяется аномальными характеристиками циклонов в положительную и отрицательную фазы САК. Именно пространственное распределение шторм-треков и интенсивность циклонов влияют в первую очередь на приземную температуру. В период, когда значения индекса САК высоки, интенсивность циклогенеза в североатлантическом регионе усиливается. Это приводит к усилению зональных ветров, несущих с Атлантического океана теплый и влажный воздух в Северную Европу. Причем сами североатлантические центры действия атмосферы и шторм-треки смещаются в северном или северо-западном направлении. При низких значениях индекса САК интенсивность центров действия атмосферы в Северной Атлантике ослабевает, а сами центры (вместе со шторм-треками) смещаются к югу или юго-востоку. При этом интенсивность зональных ветров в средних широтах уменьшается, а средиземноморских циклонов — увеличивается. Эти циклоны, перемещаясь в северо-восточном направлении, обуславливают более влажные и теплые погодные условия в южных районах Восточной Европы и Причерноморье [6, 10, 15].

**Восточно-атлантическое колебание.** В декабре и марте статистически значимая связь индекса ВАК с температурой воздуха на территории Восточной Европы практически отсутствует. В январе (рис. 2, а) структура поля композитов становится более определенной: значения разностного композита в поле температуры возрастают до 5,0–6,0 °С на северо-западе ЕТР, в восточной части Белоруссии и на севере Украины. Минимальные значения сигнала (–1,0... + 1,0 °С) наблюдаются в районе Турции, юго-восточной



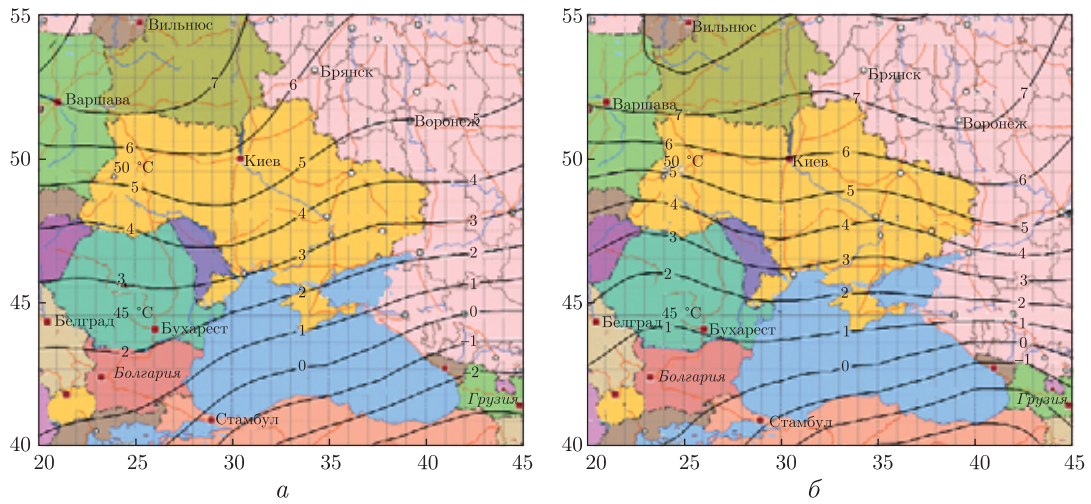


Рис. 1. Поля разностных композитов приземной температуры для Североатлантического колебания. Январь (а) и февраль (б)

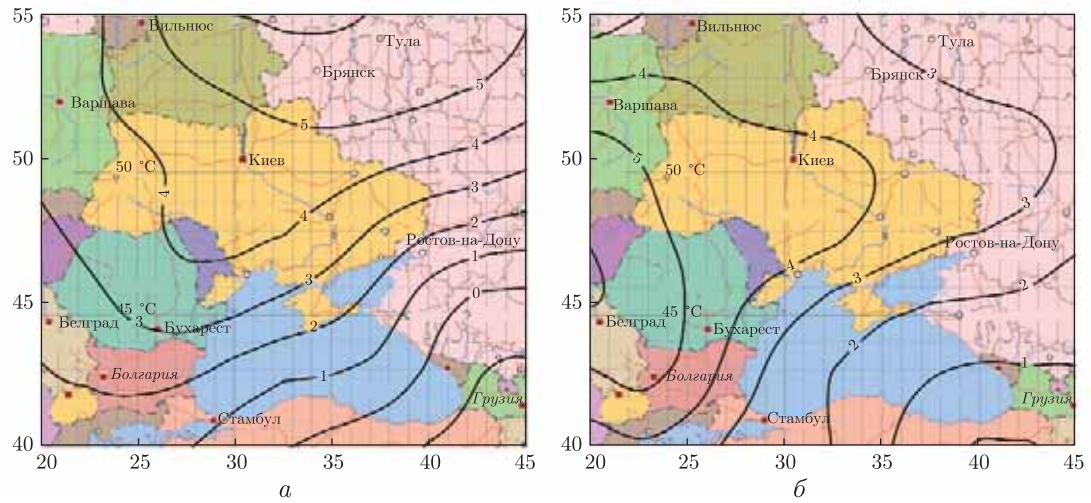


Рис. 2. Поля разностных композитов приземной температуры для Восточно-атлантического колебания. Январь (а) и февраль (б)

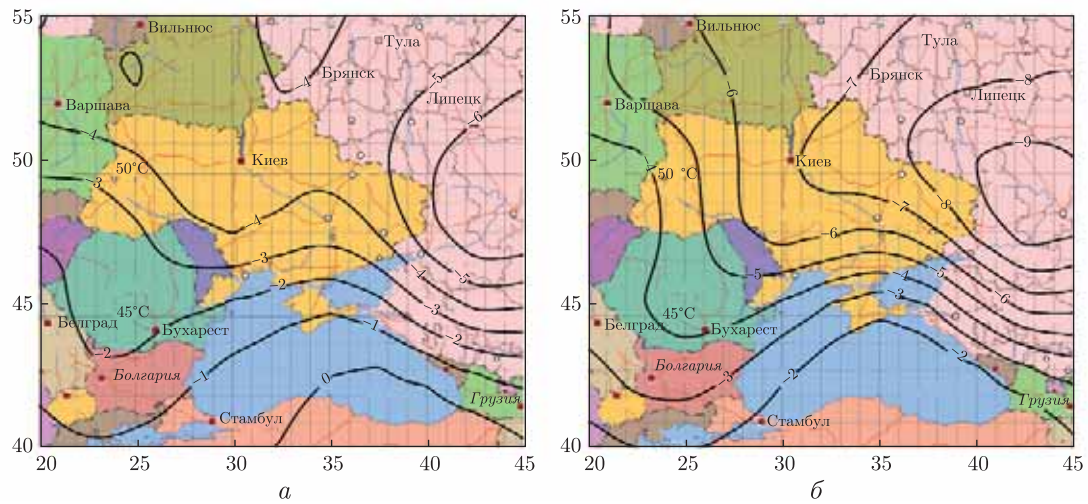


Рис. 3. Поля разностных композитов приземной температуры для Скандинавского колебания. Январь (а) и февраль (б)

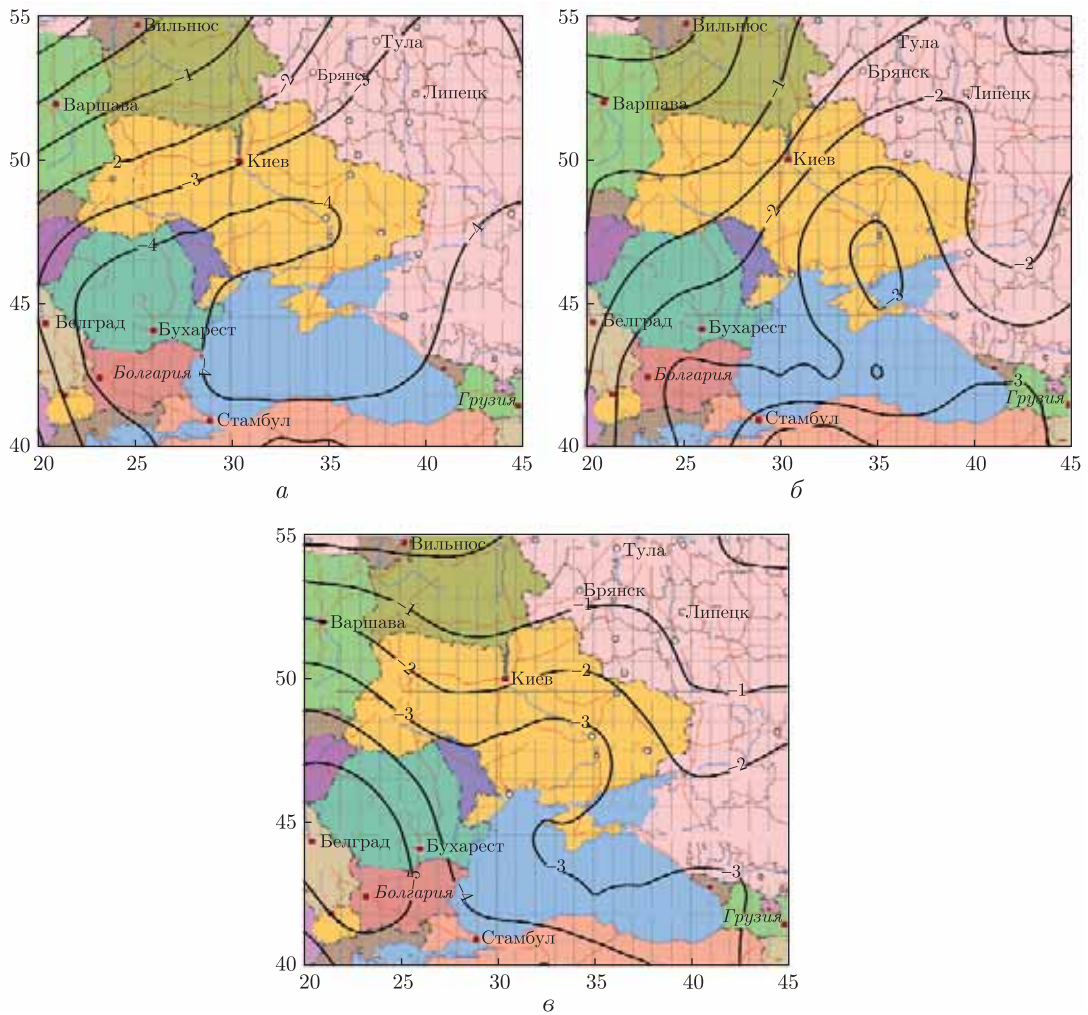


Рис. 4. Поля разностных композитов приземной температуры Восточно-атлантического/Западно-русского колебания. Декабрь (а), январь (б) и февраль (в)

части Черного моря и на Кавказе. В феврале (см. рис. 2, б) область максимальных значений сигнала смещается на юго-запад в сторону Балканского полуострова. Однако гребень повышенных значений разностного композита в поле температуры направлен в сторону Украины и центральных частей ЕТР. На востоке Турции по-прежнему сохраняется зона минимального влияния ВАК с близкими к нулевым значениям композита.

В целом можно отметить значительно большее отклонение от зональности в региональном отклике температуры на ВАК и некоторое уменьшение значимости полученных сигналов во все зимние месяцы по сравнению с САК. Тем не менее, поскольку оба сигнала характеризуют интенсивность зональной циркуляции в Атлантико-Европейском и Средиземноморском регионах и являются между собой ортогональными, можно заключить, что при положительной фазе САК и ВАК типичные среднемесячные аномалии приземной температуры могут достигать в январе  $4,3\text{ }^{\circ}\text{C}$  (в районе Белоруссии и северо-западной части ЕТР), а в феврале  $4,5\text{ }^{\circ}\text{C}$  (в районе Белоруссии) и  $3,3\text{ }^{\circ}\text{C}$  (на севере Сербии). При этом в Черноморском регионе влияние ВАК преобладает над влиянием САК.

Механизм воздействия ВАК на термические аномалии в Атлантико-Европейском и Средиземноморском регионах описан в работах [11, 12]. В них показано, что в период положительной фазы ВАК циклогенез в этих регионах интенсифицируется. Причем, в отличие от САК, которое в значительной степени определяет меридиональные смещения шторм-треков, ВАК главным образом влияет на сам циклогенез и, следовательно, связано с интенсивностью зональной циркуляции в Атлантико-Европейском регионе. Усиление/ослабление зональной циркуляции сопровождается положительными/отрицательными термическими аномалиями в рассматриваемом регионе.

**Скандинавское колебание.** Несмотря на тот факт, что СК проявляется не во все месяцы года и в целом играет второстепенную роль в формировании внутрисезонных аномалий поля давления на территории Европы, отдельные регионы исследуемой территории подвержены сильному влиянию этого колебания в январе и феврале.

Если в декабре существенной связи различных фаз СК с температурой воздуха не выявлено, то в январе ситуация кардинально меняется (рис. 3, а). Область отрицательных значений сигнала над Прикаспийской низменностью существенно расширяется, захватывая нижний Дон и крайний восток Украины, значения разностного композита увеличиваются (по абсолютной величине) до  $-5 \dots -6\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Наиболее быстро влияние СК ослабевает в южном и юго-западном направлениях. Хорошо заметно влияние Черного моря на ослабление связи региональной температуры воздуха с этим колебанием.

Февраль характеризуется максимальным развитием СК, что выражается в формировании поля устойчивых отрицательных значений композитов по всей исследуемой территории с максимальными значениями по модулю более  $9\text{ }^{\circ}\text{C}$  над Волгоградской областью (см. рис. 3, б). Зона интенсивного влияния СК распространяется на восточные и северные области Украины, и далее на Молдову, Румынию и Болгарию. Также как и в январе, хорошо видно ослабление влияния СК в Черноморском регионе.

В марте региональные проявления СК резко ослабевают, область максимальных отрицательных значений сигнала (около  $-3\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) смещается на территорию Белоруссии.

Таким образом, СК, характеризующее условия антициклонического блокирования на севере Европы, обуславливает формирования отрицательных аномалий приземной температуры в Восточной Европе до  $-4,5\text{ }^{\circ}\text{C}$  (в феврале). Несмотря на то, что такие условия наблюдаются достаточно редко, они в значительной степени влияют на формирование аномально холодных зим на территории Восточной Европы.



**Восточно-атлантическое/Западно-российское колебание.** Несмотря на то, что данный режим изменчивости оказывает влияние на Евразию в течение всего года, для территории Восточной Европы, и в особенности Причерноморья, оно не играет существенной роли в формировании температурных аномалий в январе и феврале.

Главной отличительной чертой этой осцилляции является ее наиболее выраженное проявление в первом зимнем месяце — декабре. В последующие 2–3 месяца его вклад в общую дисперсию поля в целом уменьшается. Как видно из рис. 4, *а*, в декабре размытая область максимальных (по модулю) значений сигнала охватывает юго-запад Украины, часть Балканского полуострова, северное побережье Турции и район Кавказа (т.е. Черноморский регион). Типичная величина разностного композита здесь  $-4\text{ }^{\circ}\text{C}$ . При этом наблюдается устойчивое уменьшение уровня сигнала в северо-западном направлении с переходом на противоположный знак в районе Прибалтики.

В январе (см. рис. 4, *б*) структура полученного поля похожа на декабрьскую, но имеет несколько более сложную конфигурацию с выделенным центром с отрицательными значениями сигнала на юго-востоке Украины и в Азовском море. Значения разностных композитов уменьшаются (по абсолютной величине), но достигают, тем не менее,  $-3\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

В феврале центр с максимальными отрицательными значениями разностного композита смещается на юго-запад и локализуется теперь над Балканским полуостровом. Несмотря на общее ослабление анализируемого сигнала в регионе, активность данного центра возрастает (что отражается в локальных значениях композита до  $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Другой особенностью февральского поля разностного композита является большая зональность в структуре поля изолиний (см. рис. 4, *в*), что также отражает общее ослабление ВАР колебания.

Таким образом, два последних колебания, описывающие антициклонические условия в Европейском регионе, обуславливают развитие отрицательных аномалий приземной температуры в регионе. Типичная величина этих аномалий достигает максимума по абсолютной величине (до  $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) в середине зимы в восточной части ЕТР.

**Связь экстремальных термических аномалий с циркуляционными индексами.** Анализ среднемесячных аномалий приземной температуры по данным 12-ти гидрометеорологических станций, расположенных в рассматриваемом регионе, показал, что практически все экстремально низкие аномалии в январе и феврале в период с 1950 по 2012 гг. наблюдались при отрицательной фазе ВАК. При этом в 62% случаев индекс САК также был отрицателен, а в 82% случаев наблюдалась положительная фаза СК. Типичная величина таких аномалий  $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Наименьшее влияние на формирование аномалий в январе и феврале оказывает ВАР колебание, которое (как показано выше) наиболее выражено в декабре. Экстремально теплые зимы, напротив, отмечались при положительной фазе ВАК (почти в 95% случаев), которая в 82% случаев сопровождалась отрицательной фазой СК. Экстремально высокие среднемесячные температуры как правило не превышают  $6\text{--}7\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

Таким образом, экстремально холодные зимы отмечаются в регионе при ослаблении зональной циркуляции и развитии антициклонического блокирования над Северной Европой, а экстремально теплые — при усилении зональной циркуляции в Атлантико-Европейском регионе, что проявляется в определенном сочетании положительных и отрицательных фаз анализируемых мод. Причем абсолютная величина экстремальных аномалий среднемесячной температуры в холодные зимы существенно превышает соответствующую величину термических аномалий противоположного знака.

1. Полонский А. Б. Роль океана в изменениях климата. – Киев: Наук. думка. – 2008. – 184 с.

2. Barnston A. G., Livezey R. E. Classification, seasonality and persistence of low-frequency atmospheric circulation patterns // *Monthly Weather Rev.* – 1987. – **115**, No 6. – P. 1083–1126.
3. Hurrell J. W. Decadal trends in the North Atlantic oscillation: regional temperatures and precipitation // *Science.* – 1995. – No 5224. – P. 676–679.
4. Rogers J. C. North Atlantic storm track variability and its association to the North Atlantic oscillation and climate variability of Northern Europe // *J. Clim.* – 1997. – No 7. – P. 1635–1647.
5. Нестеров Е. С. Особенности состояния океана и атмосферы в различные фазы североатлантического колебания // *Метеорология и гидрология.* – 1998. – № 8. – С. 74–82.
6. Полонский А. Б., Башарин Д. В., Воскресенская Е. Н., Ворли С. Североатлантическое колебание: описание, механизмы и влияние на климат Евразии // *Мор. гидрофиз. журн.* – 2004. – № 2. – С. 42–57.
7. Thompson, D. W. J., Wallace J. M. The Arctic oscillation signature in the wintertime geopotential height and temperature fields // *Geophys. Res. Lett.* – 1998. – **25**, No 9. – P. 1297–1300.
8. Крыжов В. Н. Связь средней годовой температуры воздуха в Северо-Западной Евразии с арктическим колебанием // *Метеорология и гидрология.* – 2004. – № 1. – С. 5–14.
9. Нестеров Е. С. Североатлантическое колебание: атмосфера и океан. – Москва, Гидрометцентр РФ, 2013. – 144 с.
10. Полонский А. Б., Башарин Д. В. О влиянии Североатлантического и Южного колебаний на изменчивость приземной температуры в Европейско-Средиземноморском регионе // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* – 2002. – **38**, № 1. – С. 135–145.
11. Нестеров Е. С. О восточно-атлантическом колебании циркуляции атмосферы // *Метеорология и гидрология.* – 2009. – № 12. – С. 32–40.
12. Вязилова Н. А. Циклоническая активность и колебания циркуляции в Северной Атлантике // *Там же.* – 2012. – № 7. – С. 5–14.
13. Bueh C., Nakamura H. Scandinavian pattern and its climatic impact // *Q. J. R. Meteorol. Soc.* – 2007. – **133**. – P. 2117–2131.
14. Krichak, S. O., Alpert P. Decadal trends in the East Atlantic-West Russia pattern and Mediterranean precipitation // *Int. J. Climatol.* – 2005. – **25**. – P. 183–192.
15. Polonsky A., Bardin M., Voskresenskaya E. Variability of extratropical cyclonic activity in the Northern hemisphere associated with global processes in the ocean-atmosphere system // *Cyclones: Formation, Triggers and Control* / Ed. K. Oouchi and H. Fudeyasu. – New York: Nova Sci. Publ., 2012. – Chapter 8. – P. 161–196.

*Морской гидрофизический институт  
НАН Украины, Севастополь  
Одесский государственный экологический университет*

*Поступило в редакцию 03.02.2014*

Член-корреспондент НАН України **О. Б. Полонський, І. О. Кібальчич**

### **Міжрічна мінливість циркуляції атмосфери і аномалії температури Східної Європи в зимовий період**

*За даними ре-аналізу NCEP і стандартних метеорологічних спостережень за 1950–2012 рр. показано, що максимальний вплив на зимові аномалії середньомісячної температури повітря в північно-західній частині Східної Європи чинить Північноатлантичне коливання, а в східній частині — Скандинавське коливання. Типові значення аномалій середньомісячної температури, що зумовлені цими модами, досягають 4–5 °С. У Чорноморському регіоні переважає вплив Східно-атлантичного і Східно-атлантичного/Західно-російського коливань. Зумовлені ними середньомісячні аномалії температури повітря досягають 2–2,5 °С. Позитивні фази Північноатлантичного і Східно-атлантичного коливань супроводжуються позитивними аномаліями приземної температури на більшій частині Східної Європи, а Скандинавське коливання — негативними аномаліями приземної температури на більшій частині Східної Європи.*

динавського і Східно-атлантичного/Західно-російського коливань — негативними. Екстремально низькі аномалії температури найчастіше відзначаються при поєднанні негативної фази Східно-атлантичного коливання і позитивної фази Скандинавського коливання, а екстремально високі — при поєднанні позитивної та негативної фаз Східно-атлантичного і Скандинавського коливань відповідно.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **A. B. Polonsky, I. A. Kibalchich**

### **Interannual variability of the atmospheric circulation and temperature anomalies in the Eastern Europe in winter**

*Using NCEP re-analysis and routine meteorological observations for 1950–2012, it is shown that the maximum impact on the winter monthly air temperature anomalies in the North-western part of the Eastern Europe is due to the North Atlantic Oscillation (NAO), while in the Eastern part to the Scandinavian pattern (SP). Typical monthly air temperature anomalies due to these modes reach 4–5 °C. In the Black Sea region, the influence of Eastern Atlantic (EAO) and Eastern-Atlantic/Western-Russian (EAWR) oscillations dominates. Associated monthly anomalies of the regional air temperature reach 2–2.5 °C. Positive phase of NAO and EAO is accompanied by positive temperature anomalies over the major proportion of the Eastern Europe, while the same phase of SP and EAWR oscillations — by negative ones. Negative temperature extremes in January-February are mostly observed, when EAO- and SP+ phases coincide, while positive extremes occur when EAO+ and SP- phases are observed simultaneously.*

В. А. Присяжнюк

## Новые данные об отложениях с “карпатской галькой” Верхнего Побужья (Летичевщина)

(Представлено академиком НАН Украины П. Ф. Гожиком)

Впервые для территории Летичевщины описаны три аллювиальных уровня. Породы верхнего уровня, относившиеся ранее к балтской свите, залегают на водоразделе и коррелируются со стольниченско-ананьевскими слоями. В породах нижнего уровня (с. Копытенцы) кроме моллюсков встречены остатки млекопитающих *Microtus cf. pitimys*, *Dicrostonyx sp.* и *Mammuthus trogontheri*.

Еще в семидесятых годах прошлого столетия мы обратили внимание на несбивку южной границы (вдоль нее показаны пестрые глины) Бердичевского и северной границы Винницкого листа (вдоль последней которого показаны балтские отложения). (Съемка масштаба 1 : 200 000.) Кроме того, в монографии А. П. Мельника [1, с. 190, рис. 12] граница распространения балтских отложений показана южнее правого берега Южного Буга (южнее Вин-

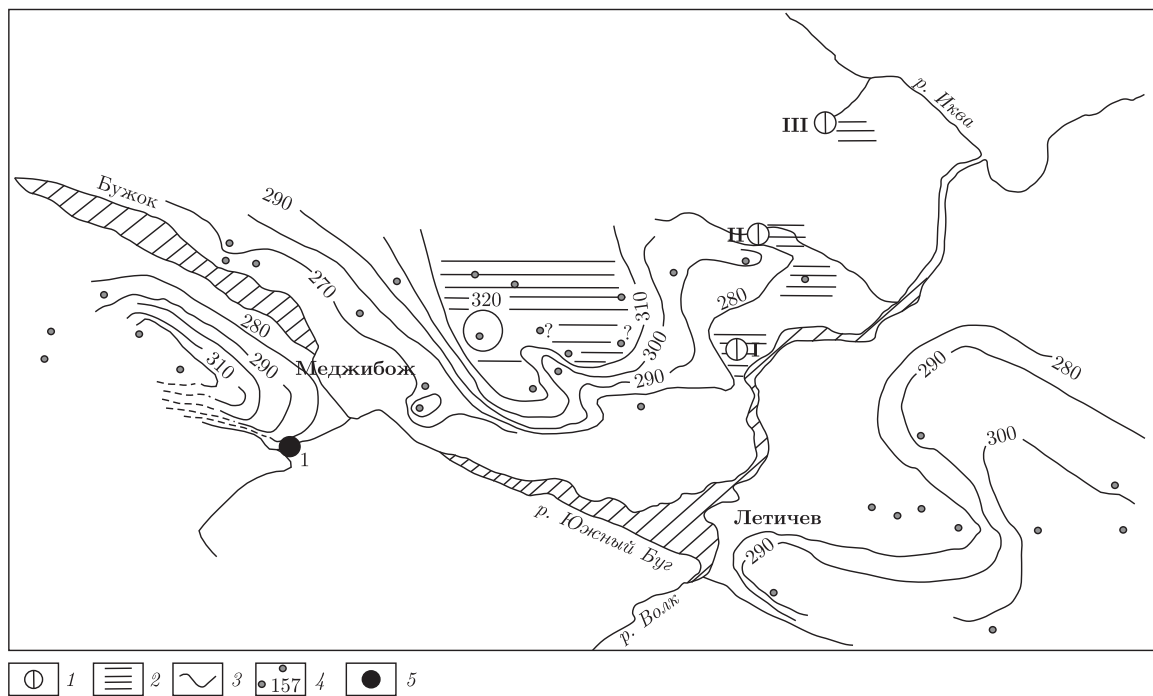


Рис. 1. Схема расположения отложений с “карпатским гравием”: 1 — обнажение песков с “карпатским гравием”; I — Копытенцы; II — Рожны; III — Чехи; 2 — скважины; 3 — распространение отложений с “карпатским гравием”; 4 — изолинии подошвы неоген-четвертичных отложений; 5 — известное местонахождение Меджибож

© В. А. Присяжнюк, 2014



ницы и Летичева), а севернее ее расположена повышенная суша. Такая ситуация побудила нас (В. А. Присяжнюк, З. М. Товстюк) опубликовать результаты съемки масштаба 1 : 50 000 южной части Бердичевского листа (А. М. Ханисенко и др.), в которой мы принимали непосредственное участие. В статье [2] показано залегание и распространение западнее р. Синь-вода (на старых картах Синь-Вода) песков с гравием и галькой типа “карпатских” на двух уровнях. Пески верхнего уровня залегают на среднесарматских глинах с прослоями типичных “пестрых”, с абсолютными отметками подошвы 272,0–280,0 м и покрыты комковатыми глинами, практически неотличимыми от “пестрых”. Пески нижнего уровня залегают также на сарматских и более древних отложениях с абсолютными отметками подошвы 248,0–258,0 м и покрыты антропогенными отложениями. Развиты они полосой вдоль левого берега Южного Буга от г. Хмельника до ст. Холоневская (пос. Янов). Галька и гравий представлены кремнями, кремнистыми песчаниками и аргиллитами, яшмоподобными и реже кристаллическими породами, характерными для балтской свиты [3]. Гравий типа карпатского среди глин подобных пестрым наблюдался мною и в скважинах алмазной партии Побужской экспедиции, расположенных намного южнее (с. Антополь Томашпольского района Винницкой области и др.).

Позднее во время пятидесятитысячной съемки Летичевщины (П. Ф. Брацлавский и др.) в нескольких скважинах и обнажениях на разных гипсометрических уровнях опять была встречена “карпатская” галька [4].

Породы верхнего, самого древнего, уровня (абсолютные отметки подошвы 310,0 м и выше) залегают на глинах верхних слоев среднего сармата и покрыты глинами типа пестрых (горизонт бурых глин?) и антропогенными суглинками. Развиты они на левобережье р. Южного Буга, на водоразделе между реками Бужок и Кудыма, вскрыты четырьмя скважинами (рис. 1). Представлены песками и песчаниками, песчанистыми глинами и глинами с включениями и прослоями гравия “карпатского” типа. Мощность их невелика: от нескольких сантиметров до 2,5 м. Вероятнее всего, что с покрывающими их глинами типа пестрых они слагают единый ритм осадконакопления (рис. 2). Эти породы практически немые, без каких-либо органических остатков. Севернее у с. Ивка (расположено на ручье, впадающем в р. Иква в пос. Старая Синява) двумя карьерами вскрыты пески этого уровня (абсолютная отметка приблизительно 310,0 м) с галькой и гравием “карпатского” типа и кристаллических пород. Но, если сарматские породы достигают абсолютных отметок 320,0 м и выше, то отложения с галькой отсутствуют. Каких-либо ископаемых остатков в этих обнажениях обнаружить также не удалось, несмотря на то что на отмывку брались крупные пробы (как минимум 2 ведра).

На топокартах площадь распространения песчаных пород хорошо подчеркивается большим количеством родников на уровне 300,0–310,0 м. Традиционно такие породы относились к балтской свите sl.

Второй, более низкий, уровень вскрыт скважиной 1542, расположенной южнее с. Рожны, имеет абсолютные отметки подошвы 277,0–280,0 м (см. рис. 2). Здесь пески с гравием и галькой мощностью 0,6 м залегают с перерывом на среднесарматских глинах, в верхней части слоя комковатых, и покрыты бурыми глинами с охристыми пятнами и типично антропогенными глинами и суглинками. Бурые глины, покрывающие пески, грубые, плотные, песчанистые, местами слоистые. Весьма возможно, что здесь переотложена часть пород верхнего уровня. Вероятные аналоги пород из этой скважины вскрыты двумя карьерами восточнее с. Чехи в правом склоне правого притока р. Иквы, в которых глинистые пески и глины залегают на среднесарматских глинах. В этих породах также не удалось обнару-

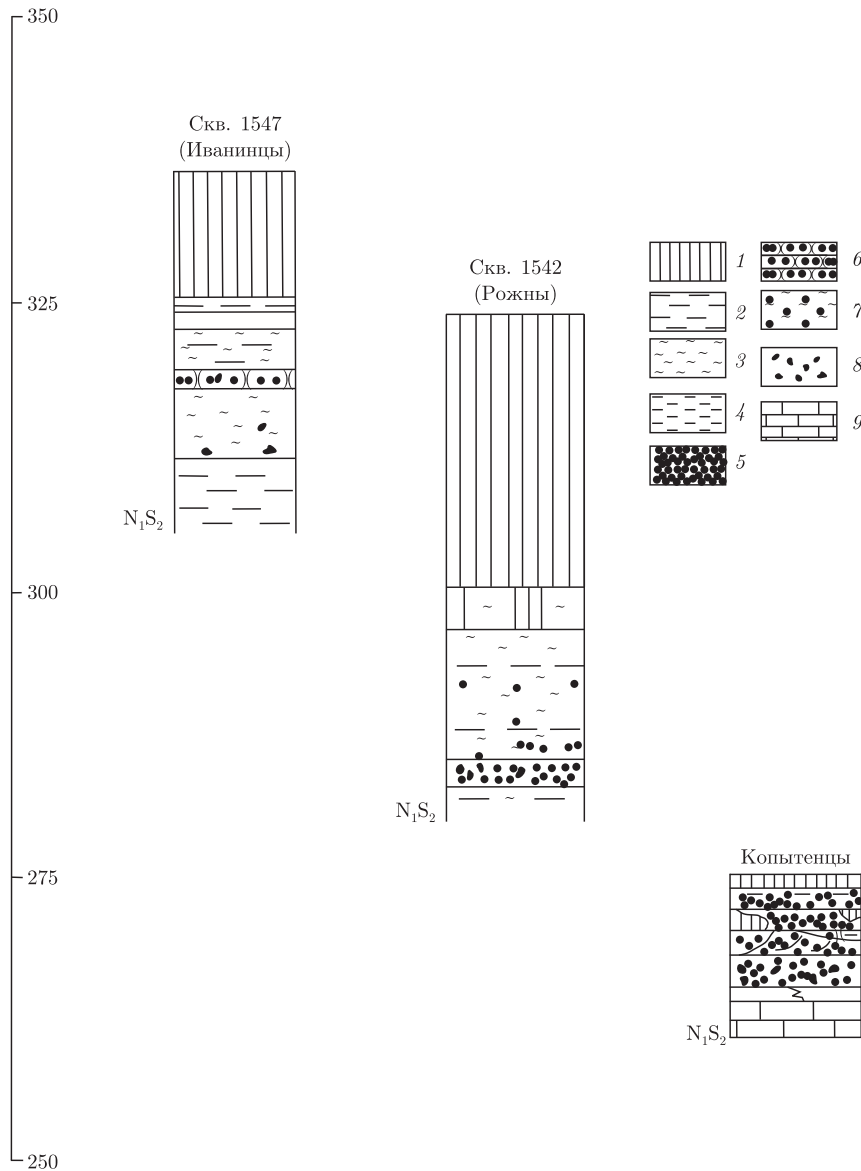


Рис. 2. Уровни залегания пород с “карпатским гравием”: 1 — суглинки; 2 — глины слоистые; 3 — глины комковатые; 4 — алевриты (суглинки озерные); 5 — пески; 6 — песчаники; 7 — глины песчанистые; 8 — галька, гравий; 9 — известняки

жить каких-либо органических остатков, несмотря на то что промывалось довольно большое количество песка (одно-два ведра). По гипсометрическому положению породы этого уровня отвечают верхней пачке песков и глин, развитых восточнее [2].

Третий, нижний, уровень вскрывается у северо-западной окраины с. Копытинцы, в правом борту ручья, впадающего здесь в р. Ю. Буг. Здесь в кустарных выработках на правом склоне долины ручья, впадающего в р. Ю. Буг, на сарматских отложениях (известняки и, возможно, глины, поскольку к контакту сармата и антропогенного аллювия приурочен довольно мощный родник, в котором проглядывает среднесарматский известняк). В 1,0 м выше родника снизу вверх залегают (описание 1991 г.):

1. Песок кварцевый от желтого до серого цвета, разномзернистый. В основании его несколько сантиметров галечника с валунчиками, состоящего из обломков кристаллических пород, сарматских известняков и “карпатской” гальки. В слое много переотложенных сарматских моллюсков как морских, так и наземных с пресноводными, а также: *Unionidae* gen., *Shadinicyclas rivicola* Lam., *Sh. morini* Servain, *Euglesa* sp., *Cincinna lilljeborgi* West., *Choanomphalus rossmaessleri* A. Schmidt (определения В. Анистратенко). Также встречен зуб *Mammuthus trogontheri* (определения В. А. Несина и Л. И. Рековца) и единичные зубы грызунов *Microtus* cf. *pitimys* и *Dicrostonix* sp. (Л. И. Рековец). Видимая мощность 0,3 м.

2. Песок кварцевый черный (гидроокислы марганца?), особенно внизу, грубозернистый, в линзах и прослоях с галькой, щебнем и валунчиками докембрийских, сарматских и “карпатских” пород. Этот слой, вероятнее всего, составляет единый ритм (пачку) аллювия со слоем 1. Остатки пресноводных моллюсков те же, что и в нижнем слое, и только добавляются наземные — *Succinea* sp., *Pupilla muscorum* L. Единично встречаются обломки косточек и зубов мелких млекопитающих. Мощность 0,4 м.

3. Песок кварцевый мелко-среднезернистый черный с более светлыми полосами 0,2 м.

4. Песок кварцевый, буровато-серый разномзернистый косослоистый, в верхней части слоя сцементирован до бурого рыхловатого песчаника 0,35–0,4 м.

5. Песок кварцевый желтый, разномзернистый, горизонтально- и косоволнисто слоистый. В нижней части слоя встречаются линзы и небольшие глыбки (?) суглинка. В верхней части слоя порода окислена (несколько буреет) и содержит “карпатскую” гальку. В слое встречаются крышечки битиний, обломки планорбариусов (вероятно переотложенные) и наземные моллюски лессового комплекса. Это *Succincta oblonga* Drap., *P. muscorum* L., *P. loessica* Ložek (?), *P. sterri* Voith., *P. poltavica* Bttg., *Columella columella* Mart., *C. ex. gr. edentula* Drap., *Vertigo (Istmia) modesta modesta* Say, *Euconulus fulvus* Reinh., *Vallonia tenuilabris* A. Braun, пластинки слизней, *Helicoidea* gen. ind., *Zonitidae* gen. ind. В нижней части слоя встречены зубы *Dicrostonix*. Мощность 1,0 м.

6. Песок карцевый, мелкозернистый, в нижней части слоя желтый, а в верхней — сизый, переходящий в верхней части в суглинок (алеверит), горизонтально слоистый 1,2–1,4 м.

7. Суглинок палево-желтый (алеверит). Мощность 1,0 м. Выше — почва и отвалы.

Положение в разрезе и породы верхнего уровня характерны для выделяемой ранее балтской свиты (s. 1) в ее верхней части [6], развитой южнее, на правобережье Ю. Буга [1, 3, 5]. Подобную характеристику и положение в разрезе имеют аллювиальные породы гауренского и стольниченского (= милештского) уровней на междуречье Днестра и Прута, верхняя пачка аллювия Кучургана и Ананьева, отнесенные П. Д. Букаччуком и другими к среднему плиоцену [7–9]. Позднее А. Н. Хубка пишет о стольниченско-анарьевских слоях [10], а В. Х. Рошка и А. Н. Хубка вводят стольниченские слои в стратиграфическую схему неогена Молдавии для молдавской плиты [11]. Эти слои в схеме соответствуют понту и нижней части киммерия. Но если судить по наличию *Plicatibaphia flabellatiformis*, которая встречается во многих разрезах, то верхи этих слоев могут охватывать и верхний плиоцен [12]. Поскольку в балтскую свиту в настоящее время разные авторы [11 и др.] включают более древние слои, не содержащие “карпатской” гальки, породы верхнего уровня должны быть выделены в отдельные слои или свиту со своим названием (например, летичевские).

Отметим, что в местах развития пород верхнего уровня поверхность кристаллического фундамента несколько опущена по сравнению с участками, где эти породы отсутствуют, хотя и те, и другие участки имеют одинаковые абсолютные высоты. Отложения среднего уровня могут принадлежать более молодому террасовому уровню древних потоков, се-

веро-западного простирания, которые унаследованы реками Кудымой, Иквой, Песчанкой, Хвосой и др. Следует также отметить, что “карпатская” галька в породах этого слоя встречается довольно редко. Большая разница в абсолютных отметках подошвы пород этого уровня и верхнего свидетельствует о более молодом их возрасте, возможно, эоплейстоценовом или даже раннеантропогеновом [13].

Аллювий нижнего уровня встречен в с. Копытенцах. Подошва аллювия в известном местонахождении моллюсков и млекопитающих у пос. Меджибожа, изучаемое после В. Д. Ласкарева [5] и до сих пор целым рядом исследователей (перечень их работ займет слишком много места) и, возможно, в с. Кудинке (по П. Ф. Гожику, Кудинец [13]) находится приблизительно на том же уровне. По автору [13], это — V-я надпойменная терраса. К сожалению, точной привязки разреза в с. Кудинке автор не дал, и нет упоминаний о каких-либо палеонтологических находках. Как бы там ни было, разрез Копытинцев второй после меджибожского, содержащий остатки наземных и пресноводных моллюсков и млекопитающих, которые могут указывать на раннеантропогеновый возраст вмещающих пород. Отсутствие “карпатского” гравия в Меджибоже объясняется отсутствием аллювия верхнего уровня западнее р. Бужка. В Копытинцах он переотложен из пород верхнего уровня, развитых в районе с. Чапли.

1. Мельник А. П. Литология и закономерности формирования неогеновых отложений Побужья. – Киев: Наук. думка, 1970. – 217 с.
2. Присяжнюк В. А., Товстюк З. М., Губкіна Т. Б. Нові дані про континентальні неогенові відклади Верхнього Побужжя // Доп. АН. Сер. Б. – 1974. – № 5. – С. 421–424.
3. Мельник А. П. Балтські відклади Верхнього Побужжя // Геол. журн. – 1960. – 20. – Вип. 3. – С. 49–55.
4. Присяжнюк В. А. Нові дані зі стратиграфії неоген-артропогенових відкладів Поділля (Летичівщина) // Комплекс стратиграфічних методів під час розшуків корисних копалин в осадовому чохла фанерозою України. – Львів, 2012. – С. 25–26.
5. Ласкарев В. Д. Геологические исследования в юго-западной России (17-й лист Общей геологической карты Европейской России) // Тр. Геолог. ком. Нов. сер., вып. 77. – Петроград: Тип. М. М. Стасюлевича, 1914. – 710 с.
6. Хубка А. Н. Литолого-фациальная характеристика и стратиграфия континентальных отложений верхнего миоцена МССР и смежных районов УССР // Стратиграфия неогена Молдавии и юга Украины. – Кишинев: АН МССР, 1969. – С. 56–72.
7. Букатчук П. Д. О среднеплиоценовых аллювиальных отложениях Палео-Днестра и Палео-Прута // Тектоника и стратиграфия. – 1985. – № 26. – С. 81–87.
8. Букатчук П. Д., Бурденко Б. В., Негадаев-Никонов К. Н., Таптыкова М. Ф. О стратиграфическом положении так называемого “кучурганского песчаника” // Палеонтология, геология и полезные ископаемые Молдавии. – Кишинев: АН МССР, 1967. – Вып. 2. – С. 159–169.
9. Букатчук П. Д., Негадаев-Никонов К. Н. Новые данные о древнейших аллювиальных отложениях в междуречьях рек Прута, Днестра и Ю. Буга // Палеонтология, геология и полезные ископаемые Молдавии. – Кишинев: АН МССР, 1967. – Вып. 2. – С. 142–146.
10. Хубка А. Н. Стратиграфическое положение стольниченско-ананьевских слоев // Биостратиграфия антропогена и неогена юго-запада СССР. – Кишинев: Штиинца, 1981. – С. 48–60.
11. Рошка В. Х., Хубка А. Н. Очерк стратиграфии неогеновых отложений Днестр-Прут // Биостратиграфия антропогена и неогена юго-запада СССР. – Кишинев: “Штиинца”, 1981. – С. 78–106.
12. Гожики П. Ф. Пресноводные моллюски позднего кайнозоя юга восточной Европы. Ч. 1. Надсемейство UNIONIDAE. – Киев, 2006. – 280 с.
13. Гожики П. Ф. Геоморфологічна будова долини р. Південного Бугу // Географічні дослідження на Україні. – Київ, 1971. – С. 67–74.

**В. А. Присяжнюк**

**Нові дані про відклади з “карпатською галькою” Верхнього Побужжя (Летичівщина)**

*Вперше для Летичівщини описано три алювіальних рівня з “карпатською галькою”. Породи верхнього рівня, що відносились раніше до балтської світи, залягають на вододілі і корелюються із стольниченсько-ананьєвськими верствами. В породах нижнього рівня (с. Копитенці) крім моллюсків зустрінуті залишки ссавців *Microthus* cf. *pitimis*, *Dicrostonix* sp. і *Mammuthus trogontheri*.*

**V. A. Prysiazhniuk**

**New data on the deposits with “Carpathian pebbles” of the Upper Pobuzhye (the Letichev region)**

*Three alluvial levels have been described for the Letichev region. The upper-level deposits attributed to the Balta suite occur at the watershed, and they are correlated with the Stolnichensko–Ananyevsk beds. In the lower-level deposits in the Copytentsy village except Mollusksfossils, the remnants of *Microthus* cf. *pitimis*, *Dicrostonix* sp. and *Mammuthus trogontheri* are found.*



УДК 628.355,544.77.032,544.722.1,544.638

К. В. Калініченко, Г. М. Ніковська, З. Р. Ульберг

## Поверхневі властивості та стійкість мулових колоїдних систем в процесах екстракції важких металів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Ю. І. Тарасевичем)

*Зіставлено вплив біологічної та хімічної екстракції важких металів на фізико-хімічні властивості мулових біоколоїдів і стійкість концентрованих мулових суспензій, що утворені на станції біологічного очищення муніципальних стічних вод. Встановлено, що найбільш значні зміни відбуваються в біологічному гетеротрофному процесі: збільшення органічної компоненти на ~10%; гідрофобізація поверхні біоколоїдів; зниження їх негативного заряду; підвищення швидкості седиментації в 10–20 разів у порівнянні з хімічними процесами.*

В результаті поширеного біологічного очищення муніципальних стічних вод у всьому світі щорічно утворюються мільйони тонн забруднених важкими металами стабілізованих (знешкоджених) мулових відходів [1–3]. Вони являють собою седиментаційно стійкі концентровані суспензії, які включають біологічні клітини, їх метаболіти, продукти трансформації забруднень, сполуки важких металів. Утилізація мулових відходів є актуальною проблемою для всього світового співтовариства. Завдяки наявності біоелементів (мікро- і макроелементів, вітамінів, амінокислот тощо), корисних мікроорганізмів та органічної речовини найбільш раціональним є їх використання як добрива після видалення важких металів [4].

У попередніх наших дослідженнях була показана можливість часткового видалення важких металів з мулових осадів у процесах екстракції — хімічної (кислотної) та біологічної (під впливом метаболітів мулових мікроорганізмів) [5]. Залежно від умов експозиції склад і відповідно властивості мулів можуть змінюватися і відображатися на їх удобрювальній цінності. Важливим етапом процесу переробки мулових відходів одночасно з видаленням важких металів є дестабілізація мулової суспензії і концентрування осаду.

Метою роботи було дослідження впливу процесів екстракції важких металів на поверхневі властивості мулових колоїдів і седиментаційну стійкість мулових суспензій.

© К. В. Калініченко, Г. М. Ніковська, З. Р. Ульберг, 2014

**Експериментальна частина.** Об'єкт дослідження — гетерогенна, багатокомпонентна мулова суспензія з концентрацією твердої фази 25 г/л, яку було відібрано на виході з очисних споруд станції біологічного очищення побутових стічних вод м. Київ.

Гідрофобність біоколоїдів визначали методом контактного кута змочування, електроповерхневі властивості — методом електроосмосу в модифікаціях, що запропоновані для природних колоїдів [6–8]. Зміну концентрації органічної речовини у муловому осаді вивчали гравіметричним методом. Седиментаційну стійкість мулової суспензії оцінювали за швидкістю осадження біоколоїдів з використанням методу турбідиметрії [9, 10]. Вміст мікробних екзополісахаридів у суспензії аналізували антроновим методом.

**Результати та їх обговорення.** Вихідна мулова суспензія характеризувалася високою стабільністю, яка зберігалася впродовж року. З одного боку, це зумовлено присутністю екзополісахаридів (ЕПС) (5 г/л), що виступають, ймовірно, в ролі стабілізатора мулової колоїдної системи, з іншого — високою концентрацією біоколоїдів (25 г/л за сухою масою), при якій, за даними літератури, починається процес структуроутворення [11, 12].

Згідно з методикою вилуговування металів, необхідне десятиразове розведення мулової суспензії, яке супроводжується її дестабілізацією і седиментацією колоїдів. У досліджуваних мулових колоїдах зконцентровані сполуки важких металів (Zn, Cu, Mn, Ni, Co, Cr, Pb) у концентраціях до 800 мкг/л [13]. Екстракцію важких металів проводили, як описано в роботах [5, 13], у хімічних процесах — дистильованою водою та розчином HCl при рН 2–3, а також у біологічних — під впливом метаболізуючих мікроорганізмів. Специфічна мікробіологічна активність ініціювалася додаванням в мулову суспензію поживних субстратів: елементної сірки — джерела енергії для хемотрофів, що окиснюють її до сірчаної кислоти; глюкози й ацетату — джерел вуглецю та енергії для ацидогенних і алкалігенних гетеротрофів, які окиснюють ці речовини до оксикарбонових кислот і вуглекислоти відповідно. При цьому важкі метали екстрагуються з мулового осаду у вигляді водорозчинних сірчаноокислих солей (хемотрофний метаболізм), комплексів з оксикарбоновими кислотами (гетеротрофний ацидогенний вектор метаболізму) і малорозчинних ультраколоїдних частинок гідроксокарбонатів (гетеротрофний алкалігенний вектор метаболізму). Як відомо, ці сполуки важких металів екологічно безпечні [5]. Тривалість хімічного процесу — 2 год; біологічного процесу в хемотрофному режимі — до 30 діб, у гетеротрофних — до 2 діб. Результати хімічного та біологічного вилуговування важких металів на прикладі цинку демонструє табл. 1.

При переробці мулових відходів важливо забезпечити ефективне концентрування біоколоїдів. Вплив умов проведення процесу екстракції важких металів на стабільність мулових суспензій ілюструє рис. 1. Швидкість седиментації мулових колоїдів при біологічній екстракції важких металів (див. *в–д*) вище у 10 і 20 разів, ніж при хімічній (див. *а, б*) — інкубація в дистильованій воді і розчині HCl. У досліджуваному діапазоні рН 2,0–9,0 для

Таблиця 1. Ефективність екстракції (Е) цинку з мулових осадів у різних умовах експозиції

Елюент	Субстрат	Тривалість, год	рН <sub>t</sub>	E, %
				Zn
Дистильована вода	—	2	6,4–6,7	10,0
HCl	—	2	2,0–2,5	83,0
Метаболізуючі мікроорганізми:				
хемотрофи	Сірка	480	2,5–3,0	81,0
гетеротрофи ацидогени	Глюкоза	48	3,5–4,0	80,0
гетеротрофи алкалігени	Ацетат натрію	48	9,2–9,4	78,0



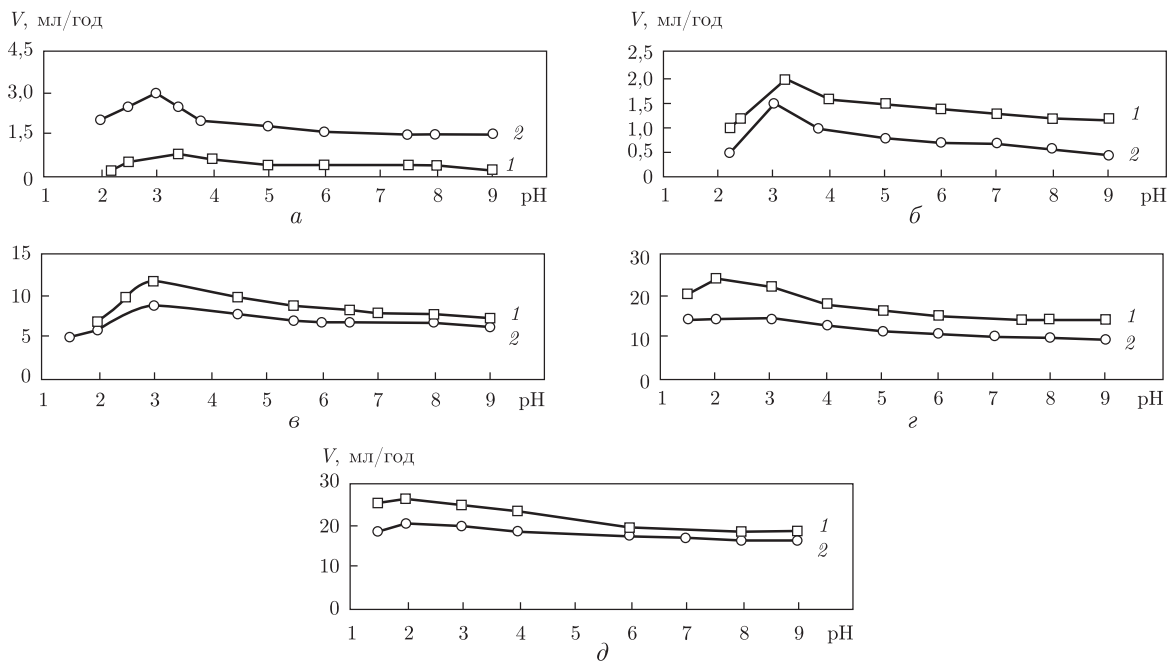


Рис. 1. Вплив рН на швидкість седиментації мулових колоїдів при інкубації в різних умовах: 1 — сирі мулові колоїди, 2 — відмиті від ЕПС центрифугуванням.  
 а: інкубація в дистильованій воді; б, в, г, д: відповідно в розчині НСl, в умовах хемотрофного, гетеротрофного ацидогенного і алкалігенного метаболізму

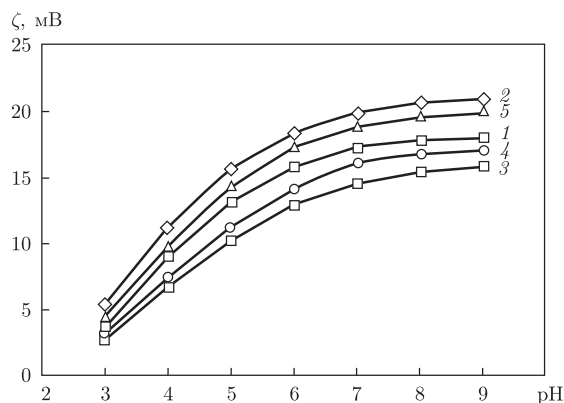


Рис. 2. рН-залежність  $\zeta$ -потенціалу мулових колоїдів при інкубації в різних умовах: 1... 5 — мулові колоїди після експозиції відповідно в дистильованій воді, в розчині НСl, в умовах гетеротрофного алкалігенного і ацидогенного, а також хемотрофного метаболізму

всіх систем мало місце підвищення швидкості седиментації в кислому середовищі. Вочевидь, швидкість седиментації мулових колоїдів максимальна при виловуванні важких металів під дією гетеротрофних біоценозів, особливо алкалігенів (див. д).

Дослідження електроповерхневих властивостей мулових колоїдів у процесах видалення важких металів проводили у діапазоні рН 3,0–9,0 після звільнення їх від домішок рідкої фази (рис. 2). Криві рН залежності зарядів всіх досліджуваних біоколоїдів характеризувалися монотонним зниженням негативного  $\zeta$ -потенціалу від  $\sim 20$  при рН 9 до 3 мВ при рН 2,8–3,0. Шляхом екстраполяції наведених кривих на вісь абсцис знаходимо, що точка

ізоелектричного стану мулових колоїдів відповідає рН  $\sim 2,5$ . Форма кривих рН залежності  $\zeta$ -потенціалу дозволяє припустити, що за формування поверхневого заряду вивчених колоїдів в різних умовах інкубації відповідальні кислотні, головним чином, карбоксильні групи. ІЧ спектроскопічні дослідження підтвердили цей висновок [14]. Отримані дані вказують на підвищення негативного заряду мулових колоїдів при видаленні позитивно заряджених важких металів. У той самий час при біологічній екстракції металів за участю гетеротрофних біоценозів можна відзначити зниження негативного заряду біоколоїдів у порівнянні з контрольною експозицією в дистильованій воді (див. криві 3, 4 на рис. 2).

У процесах екстракції важких металів з мулових колоїдів відзначено зниження вмісту ЕПС у хімічних процесах у дистильованій воді та розчині НСІ до 1,20 і 1,00 г/л та у біологічних процесах за участю хемотрофних мікроорганізмів та ацидогенних і алкалігенних гетеротрофів до 0,1, 0,45, 0,30 г/л відповідно.

Для оцінки впливу ЕПС на стійкість мулових суспензій було проведено вилучення екзополімерів (шляхом центрифугування) і ресуспендування осадів в аліквоті дистильованої води. Встановлено, що при великих концентраціях ( $> 1,00$  г/л) ЕПС грають стабілізуючу роль, при менших — діють як флокулянт (див. рис. 1).

Дослідження гідрофобності сирих, що містять екзополісахариди (табл. 2, рядок 1), і відмитих від ЕПС зразків (рядок 2) мулових колоїдів після видалення металів у різних режимах демонструють підвищення гідрофільності пулу ЕПС (рядок 3) у процесах екстракції металів у порівнянні з контрольною експозицією в дистильованій воді; після звільнення від ЕПС показники гідрофобності мулових колоїдів, інкубованих у розчині НСІ, а також у присутності хемотрофного метаболіту — біогенної  $H_2SO_4$ , — подібні і близькі до  $\theta^\circ$  контролю. У той самий час виявлено виражену гідрофобізацію поверхні відмитих від ЕПС біоколоїдів при вилуговуванні металів в умовах гетеротрофного метаболізму. Це корелює із зниженням негативного заряду біоколоїдів у порівнянні з контрольною експозицією в дистильованій воді (див. криві 3, 4 на рис. 2) і з найбільшою ефективністю седиментації мулових систем при вилуговуванні металів під дією гетеротрофних мікроорганізмів.

У процесах видалення важких металів у різних режимах відбувається зміна органічної компоненти мулового осаду в порівнянні з вихідним осадом. Отримані результати показали, що муловий осад містить 52,0% органічної речовини; після хімічної (кислотної) екстракції металів — 45,0%; після біологічної екстракції за участю хемотрофів — 31,5%, гетеротрофів — 62,0 — 65,8%. Згідно з вимогами Державного стандарту України щодо осадів стічних вод для сільськогосподарського застосування, вміст органічної речовини має бути не меншим

Таблиця 2. Значення контактного кута змочування біоматеріалу

Зразок	Контактний кут змочування, град		
	1	2	3
Муловий осад	53,0	40,0	25,0
Те саме після хімічної екстракції	45,0	38,0	10,0
Те саме після біологічної екстракції за участю:			
хемотрофів	2,0	36,0	2,0
ацидогенних гетеротрофів	53,5	90,0	5,0
алкалігенних гетеротрофів	30,0	90,0	5,0

Примітка. 1 — суспензія з ЕПС; 2 — те саме, відмите від ЕПС; 3 — пул ЕПС (сконцентрований висушуванням супернатант).

за 40% [15]. Очевидно, що найбільш перспективною є конверсія мулового осаду у добриво під дією гетеротрофних біоценозів.

Таким чином, виконані дослідження показали, що стійкість мулових суспензій обумовлена високою концентрацією твердої фази і мікробних екзополімерів. У процесах біологічної екстракції металів концентрація ЕПС знижується до оптимальних значень для протікання ефективної флокуляції та седиментації мулових колоїдів. Важливу роль у дестабілізації мулової колоїдної системи мають такі фактори, як гідрофобізація поверхні біоколоїдів, зниження їх негативного  $\zeta$ -потенціалу, що в комплексі з оптимізацією вмісту твердої фази і ЕПС спричинює підвищення швидкості їх седиментації в 10–20 разів у порівнянні з хімічними процесами. Можливість ефективного розділення мулової суспензії та седиментації осаду виключно важлива для створення колоїдно-хімічного процесу кондиціонування та утилізації мулових відходів.

1. Berbecea A., Radulov I., Sala F. Agricultural use of sewage sludge pros and cons // Res. J. Agr. – 2008. – 40, No 2. – P. 15–20.
2. Vesilind P. A., Spinosa L. Part I: Sludge production and characterization. Production and regulations // Sludge into biosolids. Processing, disposal and utilization. – London: IWA Publ., 2001. – P. 3–18.
3. Matthews P. Part II: Options for biosolids utilization and sludge disposal. Agricultural and other land uses // Sludge into biosolids. Processing, disposal and utilization. – London: IWA Publ., 2001. – P. 41–73.
4. Евилевич А. З., Евилевич М. А. Утилизация осадков сточных вод. – Ленинград: Стройиздат, Ленингр. отд-ние, 1988. – 248 с.
5. Никовская Г. Н., Калининченко К. В. Биовыщелачивание тяжелых металлов из иловых осадков биологической очистки муниципальных сточных вод // Химия и технология воды. – 2013. – 35, № 2. – С. 140–150.
6. Тажибяева С. М., Мусабеков К. Б., Образымбетова А. Б. Поверхностные свойства дрожжевых клеток // Коллоид. журн. – 2003. – 65, № 1. – С. 132–135.
7. Бойко Ю. П., Алексеев О. Л., Овчаренко Ф. Д. Методика исследования электроповерхностных свойств высокодисперсных веществ // Там же. – 1977. – 39, № 3. – С. 433–437.
8. Калининченко К. В., Никовская Г. Н., Ульберг З. Р. Изменение поверхностных свойств и устойчивости биокolloидов иловой системы при экстракции тяжелых металлов // Там же. – 2013. – 75, № 3. – С. 304–308.
9. Никовская Г. Н., Ульберг З. Р., Коваль Л. А. Коллоидно-химические процессы в биотехнологии тяжелых металлов из почвы // Там же. – 2001. – 63, № 6. – С. 820–824.
10. Шиммель Г. Методика электронной микроскопии. – Москва: Мир, 1972. – 300 с.
11. Новаков И. А., Навроцкий А. В., Дрябина С. С. и др. Исследование структурообразования дисперсий активного ила в процессах уплотнения и флокуляции // Изв. ВолгГТУ. – 2007. – 31, № 5. – С. 116–119.
12. Урьев Н. Б., Кучин И. В. Физико-химическая динамика дисперсных систем // Успехи химии. – 2004. – 73, № 1. – С. 39–62.
13. Калининченко К. В., Никовская Г. Н., Ульберг З. Р. Биоэкстракция тяжелых металлов из коллоидных иловых систем // Коллоид. журн. – 2012. – 74, № 5. – С. 576–581.
14. Калининченко К. В., Никовская Г. Н., Ульберг З. Р. Состояние тяжелых металлов в иловых коллоидных системах // Доп. НАН України. – 2012. – № 7. – С. 128–131.
15. ДСТУ ТУ 204 України 76–93 “Добрива з осадів стічних вод”.

К. В. Калиниченко, Г. Н. Никовская, З. Р. Ульберг

**Поверхностные свойства и устойчивость иловых коллоидных систем в процессах экстракции тяжелых металлов**

*Сопоставлено влияние биологической и химической экстракции тяжелых металлов на физико-химические свойства иловых биокolloидов и устойчивость концентрированных иловых суспензий, образованных на станции биологической очистки муниципальных сточных вод. Установлено, что наиболее значительные изменения происходят в биологическом гетеротрофном процессе: увеличение органической компоненты на ~10%; гидрофобизация поверхности биокolloидов; снижение их отрицательного заряда; повышение скорости седиментации в 10–20 раз по сравнению с химическими процессами.*

K. V. Kalinichenko, G. N. Nikovskaya, Z. R. Ulberg

**Surface properties and stability of colloidal sludge systems in the processes of heavy metals extraction**

*The influences of biological and chemical extractions of heavy metals on the physical and chemical properties of sludge biocolloids and the stability of a concentrated sludge suspension formed on the municipal wastewater biological treatment plant are compared. The most significant changes occur at the biological heterotrophic process, namely: increase of the organic component by ~10%, hydrophobization of biocolloids surface, decrease of their negative charge, and increase of the sedimentation rate by 10–20 times as compared with chemical processes.*

Ю. О. Тітов, Н. М. Білявина, В. Я. Марків,  
член-кореспондент НАН України М. С. Слободяник,  
В. В. Полубінський

## Синтез та кристалічна структура двошарових індотитанатів $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$

*Визначено протяжність області сполук з шаруватою перовськітоподібною структурою (ШПС) в ряду двошарових перовськітів  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$ . Синтезовано нові індотитанати  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  (Ln – La, Pr, Nd, Sm) при термообробці еквімолярних сумішей  $\text{Sr}_2\text{TiO}_4 + \text{LnInO}_3$  та визначено їх кристалічну ШПС методом рентгенівської дифракції на порошках. Встановлено належність ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  (Ln – La, Pr, Nd, Sm) до структурного типу  $\text{BaLa}_2\text{In}_2\text{O}_7$  (пр. гр.  $R4_2/mnt$ ). Значення факторів недостовірності  $R_B$  становлять 0,060–0,069. Проаналізовано особливості ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  та встановлені взаємозв'язки склад – будова ШПС.*

Представники сімейства сполук загального складу  $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$  володіють надзвичайно широким спектром фізико-хімічних властивостей, який включає, зокрема, надпровідність, значний магнітоопір, сегнетоелектричні властивості, каталітичну активність [1]. Наявність цих властивостей у сполук типу  $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$  значною мірою зумовлена особливостями будови їх шаруватої перовськітоподібною структури (ШПС), в якій перовськітоподібні блоки з  $n$  шарів, сполучених вершинами октаедрів  $\text{BO}_6$ , перемежуються шарами поліедрів  $\text{AO}_9$  [1, 2].

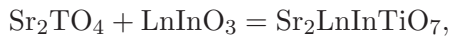
Одним із шляхів регулювання властивостей сполук типу  $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$  є зміна характеру та ступеня деформації основних структурних елементів ШПС – октаедрів  $\text{BO}_6$  і поліедрів  $\text{AO}_9$  й  $\text{AO}_{12}$ . Цього можна досягти шляхом введення в еквівалентні позиції ШПС різнотипних (як за розміром, так і за електронною будовою) атомів. Можливості такого підходу досить детально досліджені для атомів А-позиції ШПС в сполуках типу  $(\text{A}, \text{A}^1)_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$  [1, 2]. Відомості щодо існування і особливостей будови ШПС сполук типу  $\text{A}_{n+1}(\text{B}, \text{B}^1)_n\text{O}_{3n+1}$  вкрай обмежені.

У даному повідомленні досліджено можливості утворення та будови сполук  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  із двошаровою ШПС, у В-позиції яких розташовані різнорозмірні ( $\Delta R_{VI} = 0,0195$  нм) атоми  $p$ - й  $d$ -елементів (In й Ti).

Полікристалічні зразки загального складу  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  синтезували за керамічною технологією (двостадійна термообробка при 1570 К ( $\tau = 3 + 3$  год) з проміжною перешихтовкою) з еквімолярної суміші  $\text{Sr}_2\text{TiO}_4$  та  $\text{LnInO}_3$ . Титанат стронцію  $\text{Sr}_2\text{TiO}_4$  із одношаровою ШПС отримували при термообробці спільноосаджених гідроксикарбонатів [3], перовськіти  $\text{LnInO}_3$  – спільноосаджених гідроксидів.

Рентгенівські дифракційні спектри полікристалічних зразків записано на дифрактометрі ДРОН-3 у дискретному режимі (крок сканування  $0,03^\circ$ , експозиція в точці 5 с) на мідному фільтрованому випромінюванні. Управління процесом зйомки та збором інформації, початкова обробка дифрактограм, а також структурні розрахунки проведено з використанням апаратно-програмного комплексу [4].

З кристалохімічної точки зору утворення нових сполук  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  із двошаровою ШПС можна представити як “дорощування” другого шару октаедрів  $\text{InO}_6$  в одношаровому перовськітоподібному блоці титанату  $\text{Sr}_2\text{TiO}_4$  перовськітом  $\text{LnInO}_3$  за такою схемою:



що й зумовило вибір  $\text{Sr}_2\text{TiO}_4$  та  $\text{LnInO}_3$  вихідними компонентами для синтезу очікуваних  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  із двошаровою ШПС.

Результати рентгенографічного дослідження термооброблених зразків валового складу  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La}-\text{Gd}$ ) показали утворення чотирьох нових індоитанатів  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  з  $\text{Ln} - \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$ . Їх дифрактограми є аналогічними дифрактограмам двошарового  $\text{BaLn}_2\text{In}_2\text{O}_7$ .

Зразки валового складу  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{Eu}, \text{Gd}$ ) виявились двофазними і складаються з фази зі структурою кубічного перовськіту на основі  $\text{SrTiO}_3$  та фази зі структурою типу  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$ . Її періоди кристалічної ґратки становлять приблизно півсуми відповідних періодів сполук  $\text{SrIn}_2\text{O}_4$  та  $\text{SrLn}_2\text{O}_4$  ( $\text{Ln} - \text{Eu}, \text{Gd}$ ) зі структурами типу  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$ , що дає підставу розглядати цю фазу як твердий розчин зазначених сполук загального складу  $\text{SrIn}_{2-x}\text{Ln}_x\text{O}_4$  з  $x \approx 1$ .

Особливості будови структури  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  (наявність подвійних рутилоподібних ланцюжків октаедрів  $\text{BO}_6$ , які утворюють тривимірний каркас, в каналах якого розміщені великі іони типу А [5]), а також існування сполук  $\text{SrLn}_2\text{O}_4$  ( $\text{Ln} - \text{Pr}-\text{Lu}$ ) та  $\text{SrIn}_2\text{O}_4$  [6] зі структурами типу  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  дають підстави для припущення, що однією із основних причин руйнування ШПС в ряду  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  (починаючи з  $\text{Ln} - \text{Eu}$ ) є, очевидно, наближення розміру іона рідкісноземельних елементів (РЗЕ) до розмірів іона  $\text{In}^{3+}$  ( $\Delta R < 14\%$  при  $\text{Ln}-\text{Eu}$ ). В результаті цього стає можливим їх ізоморфна сумісність в оксигенооктаедричних В-позиціях структури типу  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$ . Це заважає утворенню сполук  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  з двошаровою ШПС і призводить до формування твердих розчинів складу  $\text{SrIn}_{2-x}\text{Ln}_x\text{O}_4$  ( $\text{Ln} - \text{Eu}, \text{Gd}$ ) зі структурою типу  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$ .

Іони  $\text{Ln}^{3+}$  за розмірами, більшими за іони  $\text{Eu}^{3+}$ , не можуть знаходитись разом із значно меншими за розмірами іонами  $\text{In}^{3+}$  в оксигенооктаедричних В-позиціях структури типу  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  ( $\Delta R > 14\%$ ), тому при  $\text{Ln} - \text{La}-\text{Sm}$  замість фаз  $\text{SrIn}_{2-x}\text{Ln}_x\text{O}_4$  утворюються індивідуальні сполуки  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  з двошаровою ШПС, в якій великі катіони РЗЕ ( $\text{Ln} - \text{La}-\text{Sm}$ ) розміщуються разом з великими катіонами стронцію виключно в позиціях з координаційними числами 9 і 12.

Індексування дифрактограм  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$ ) показало належність їх кристалічної структури до тетрагональної сингонії. Систематика погасань відбиттів на дифрактограмах вказує на такі можливі просторові групи: центросиметричну  $P4_2/mnm$  або нецентросиметричні  $P\bar{4}n2$  й  $P4_2nm$ . Тест на генерацію сигналу другої гармоніки лазерного випромінювання ІАГ : Nd лазера показав, що відносна інтенсивність сигналу  $I_{2\omega}$  для  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$ ) не перевищує 0,01  $I_{2\omega}$  для нецентросиметричної сполуки  $\text{La}_4\text{Ti}_4\text{O}_{14}$  із ШПС. Така величина  $I_{2\omega}$  однозначно вказує на належність кристалічної структури  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  до центросиметричної просторової групи  $P4_2/mnm$ .

Первинну оцінку координатних параметрів атомів для початкових моделей структур  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}$ ) проведено за відомими структурними даними для  $\text{BaLa}_2\text{In}_2\text{O}_7$  з двошаровою ШПС [7] (пр. гр.  $P4_2/mnm$ ). Результати уточнення початкових моделей структур  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  представлено в табл. 1 та на рис. 1, 2. Уточнені при роз-

Таблиця 1. Кристалографічні дані  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  (Ln – La, Pr, Nd, Sm)

Позиція	Атом	$\text{Sr}_2\text{LaInTiO}_7$			$\text{Sr}_2\text{PrInTiO}_7$			$\text{Sr}_2\text{NdInTiO}_7$			$\text{Sr}_2\text{SmInTiO}_7$		
		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
4f	(Sr, Ln)(1)	0,2556(2)	0,2556(2)	0	0,257(2)	0,257(2)	0	0,2675(4)	0,2675(4)	0	0,2622(3)	0,2622(3)	0
8j	(Sr, Ln)(2)	0,2655(5)	0,2655(5)	0,1879(2)	0,258(5)	0,258(5)	0,1851(2)	0,265(2)	0,265(2)	0,1841(2)	0,2707(3)	0,2707(3)	0,1839(2)
8j	(In, Ti)	0,2423(4)	0,2423(4)	0,4001(2)	0,2442(3)	0,2442(3)	0,4013(5)	0,2425(3)	0,2425(3)	0,3995(3)	0,2351(2)	0,2351(2)	0,3994(3)
4g	O(1)	0,769(2)	0,231(2)	0	0,798(3)	0,202(3)	0	0,816(2)	0,184(2)	0	0,816(2)	0,184(2)	0
8j	O(2)	0,177(2)	0,177(2)	0,298(3)	0,167(2)	0,167(2)	0,297(3)	0,166(1)	0,166(1)	0,296(2)	0,155(2)	0,155(2)	0,296(2)
8h	O(3)	0	0,5	0,107(1)	0	0,5	0,105(2)	0	0,5	0,104(1)	0	0,5	0,106(1)
4e	O(4)	0	0	0,107(1)	0	0	0,103(2)	0	0	0,100(1)	0	0	0,096(1)
4e	O(5)	0	0	0,389(2)	0	0	0,397(3)	0	0	0,397(2)	0	0	0,400(2)
Просторова група	$P4_2/mnm$				$P4_2/mnm$				$P4_2/mnm$				$P4_2/mnm$
Періоди кристалічної ґратки, нм	$a = 0,5669(4)$ $c = 2,0528(9)$				$a = 0,5691(1)$ $c = 2,0383(4)$				$a = 0,5697(1)$ $c = 2,034(4)$				$a = 0,5678(2)$ $c = 2,0248(6)$
Фактор недостовірності, $R_B$	0,060				0,068				0,069				0,069
Незалежні відбиття	136				209				200				169
Загальний ізотропний $V$ -фактор $\cdot 10^{-2}$ , нм <sup>2</sup>	1,66(4) для атомів металів 3,2(3) для атомів оксигену				3,31(2)				2,49(3)				3,01(4)
Параметр текстури	—				—				—				0,798(8) Вісь текстури 001



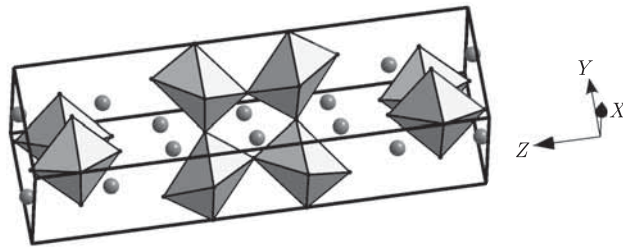


Рис. 1. Кристалічна структура  $\text{Sr}_2\text{NdInTiO}_7$  у вигляді октаедрів  $(\text{In,Ti})\text{O}_6$  та атомів Sr й Nd (кружки)

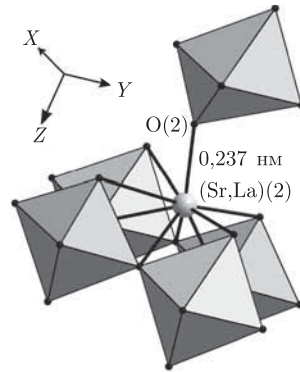


Рис. 2. Будова міжблочної границі в шаруватій перовськітоподібній структурі  $\text{Sr}_2\text{LaInTiO}_7$

рахунках структури склади цих сполук у межах похибки визначення відповідають експериментально заданим.

Основними структурними одиницями індоитанатів  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La, Pr, Nd, Sm}$ ) є безпосередньо не зв'язані між собою двовимірні (нескінченні в напрямках осей  $X$  і  $Y$ ) перовськітоподібні блоки, кожен з яких складається з двох шарів деформованих (довжини відстаней  $(\text{In, Ti})-\text{O}$  знаходяться в межах від 0,189(3) до 0,221(2) нм) октаедрів  $(\text{In, Ti})\text{O}_6$  (див. рис. 1). У напрямі діагоналі площини  $XY$  суміжні блоки зміщені один відносно іншого на половину ребра перовськітового кубу, розділені шаром поліедрів  $(\text{Sr, Ln})(2)\text{O}_9$  та з'єднуються один з одним за допомогою зв'язків  $-\text{O}-(\text{Sr, Ln})(2)-\text{O}-$ .

У перовськітоподібних блоках октаедри  $(\text{In, Ti})\text{O}_6$  зв'язані між собою лише вершинами, причому кожний октаедр  $(\text{In, Ti})\text{O}_6$  має п'ять спільних вершин з сусідніми октаедрами свого блока, а безпосередній зв'язок між октаедрами  $(\text{In, Ti})\text{O}_6$  сусідніх перовськітоподібних блоків у ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  відсутній.

У ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  розподіл атомів Sr й La по позиціях 4f й 8j має статистичний характер. Координаційне число внутрішньоблочних атомів  $(\text{Sr, Ln})(1)$  дорівнює 12, а їх координаційний поліедр являє собою деформований кубооктаедр. У поліедри  $(\text{Sr, Ln})(2)\text{O}_9$  вісім (чотири  $\text{O}(2)$ , два  $\text{O}(3)$ , один  $\text{O}(4)$  та один  $\text{O}(5)$ ) атомів кисню належать до того самого блока, що й атоми  $(\text{Sr, Ln})(2)$ , а дев'ятий атом кисню ( $\text{O}(2)$ ) належить до сусіднього блока (див. рис. 2). Із дев'яти атомів кисню поліедра  $(\text{Sr, Ln})(2)\text{O}_9$  два атоми  $\text{O}(2)$  розташовані на значно більших відстанях (0,337(3)–0,355(3) нм) від атомів  $(\text{Sr, Ln})(2)$ , ніж решта, тому координаційне число атомів  $(\text{Sr, Ln})(2)$  можна розглядати як 7 + 2. Ступінь деформації зовнішньоблочних поліедрів  $(\text{Sr, Ln})(2)\text{O}_9$ , які “зшивають” сусідні перовськітоподібні блоки, значно більша, ніж у внутрішньоблочних кубооктаедрів  $(\text{Sr, Ln})(1)\text{O}_{12}$  (рис. 3; табл. 2).

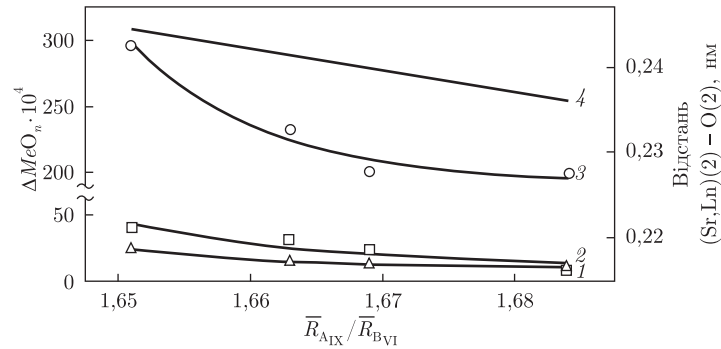


Рис. 3. Залежності ступенів деформації ( $\Delta$ ) поліедрів  $(\text{In,Ti})\text{O}_6$  (крива 1),  $(\text{Sr,Ln})\text{O}_{12}$  (крива 2),  $(\text{Sr,Ln})\text{O}_9$  (крива 3) та довжини міжблочної відстані  $(\text{Sr,Ln})(2)-\text{O}(2)$  (крива 4) у ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  від співвідношення величин середніх кристалічних іонних радіусів атомів у А- й В-позиціях ШПС ( $\bar{R}_{\text{AIX}}/\bar{R}_{\text{BVI}}$ ). Розрахунок ступеня деформації поліедрів  $\text{MeO}_n$  у кристалічній структурі  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  проведено за формулою:  $\Delta = 1/n \sum [(R_i - \bar{R})/\bar{R}]^2$ , де  $R_i$  — відстані  $\text{Me}-\text{O}$ ;  $\bar{R}$  — середня відстань  $\text{Me}-\text{O}$ ;  $n$  — координаційне число [8]

Аналіз величин міжатомних відстаней у ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La, Pr, Nd, Sm}$ ) показав, що зменшення розміру атомів РЗЕ призводить до збільшення як міжблочної відстані  $(\text{Sr,Ln})(2)-\text{O}(2)$  (від 0,237(2) нм для  $\text{Sr}_2\text{LaInTiO}_7$  до 0,245(2) нм для  $\text{Sr}_2\text{SmInTiO}_7$ ), так і двох найбільш довгих відстаней  $(\text{Sr,Ln})(2)-\text{O}(2)$  поліедра  $(\text{Sr,Ln})(2)\text{O}_9$  (від 0,337(3) нм для  $\text{Sr}_2\text{LaInTiO}_7$  до 0,355(3) нм для  $\text{Sr}_2\text{SmInTiO}_7$ ).

Зіставленням ступенів деформації поліедрів  $\text{MeO}_n$  у ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  та відомих двошарових титанатів й індатів типу  $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$  (див. табл. 2) показано, що деформованість ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  близька до такої для двошарових  $\text{BaLn}_2\text{In}_2\text{O}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La-Nd}$ ) і на кілька порядків перевищує таку для  $\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$  із однотипними атомами в А- й В-позиціях ШПС. Окремо слід відзначити обернено пропорційний характер залежності ступеня деформації поліедрів  $\text{MeO}_n$  у ШПС  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  від розміру атомів РЗЕ (див. рис. 3). При цьому величина  $\Delta(\text{Sr,Sm})\text{O}_9$  у ШПС  $\text{Sr}_2\text{SmInTiO}_7$  ( $296 \cdot 10^{-4}$ ) перевищує значення  $\Delta\text{NdO}_9$  у ШПС останнього члена ряду двошарових індатів  $\text{BaNd}_2\text{In}_2\text{O}_7$  ( $296 \cdot 10^{-4}$ ) (див. табл. 2) і є однією із найбільших серед сполук типу  $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$  із ШПС.

Таким чином, виявлені особливості будови ШПС індоцитанатів  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  ( $\text{Ln} - \text{La, Pr, Nd, Sm}$ ) дають підстави для висновку, що однією із основних причин обмеженості ряду двошарових індоцитанатів  $\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$  є дестабілізація ШПС внаслідок наростання деформованості міжблочних поліедрів  $(\text{Sr,Ln})(2)\text{O}_9$  та зменшення міцності зв'язування

Таблиця 2. Ступінь деформації ( $\Delta$ ) поліедрів  $\text{MeO}_n$  у двошаровій структурі деяких сполук типу  $\text{A}_{n+1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$

Сполука	Пр. гр.	Поліедр		
		$\Delta \cdot 10^4$	$\Delta \cdot 10^4$	$\Delta \cdot 10^4$
$\text{Sr}_2\text{LnInTiO}_7$ ( $\text{Ln} - \text{La-Sm}$ )	$\text{P4}_2/\text{mmm}$	$(\text{Sr,Ln})\text{O}_{12}$	$(\text{Sr,Ln})\text{O}_9$	$(\text{In,Ti})\text{O}_6$
		8–41	199–296	10–24
$\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$ [9]	$\text{I4}/\text{mmm}$	$\text{SrO}_{12}$	$\text{SrO}_9$	$\text{TiO}_6$
		0,2	7,0	0,6
$\text{BaLn}_2\text{In}_2\text{O}_7$ ( $\text{Ln} - \text{La-Nd}$ ) [7]	$\text{P4}_2/\text{mmm}$	$\text{BaO}_{12}$	$\text{LnO}_9$	$\text{InO}_6$
		72–32	234–279	24–18

Примітка. Для порівняння використано дані для  $\text{BaLn}_2\text{In}_2\text{O}_7$ , оскільки двошарові  $\text{SrLn}_2\text{In}_2\text{O}_7$  не існують.

сусідніх перовськітоподібних блоків у результаті збільшення довжини міжблочного зв'язку (Sr,Ln)(2)–O.

1. Schaak R. E., Mallouk T. E. Perovskites by design: a toolbox of solid-state reactions // Chem. Mater. – 2002. – 14, No 4. – P. 1455–1471.
2. Александров К. С., Безносиков Б. В. Перовскиты. Настоящее и будущее. – Новосибирск: Наука СО РАН, 2004. – 231 с.
3. Титов Ю. О., Слободяник М. С., Краєвська Я. А. Особливості утворення і ізоморфізм сполук Рудлессдена–Попера типу  $Sr_{n+1}V_nO_{3n+1}$  (B = Sn, Ti,  $n = 1, 2$ ) // Укр. хим. журн. – 2008. – 74, № 7. – С. 17–22.
4. Марків В. Я., Белявіна Н. М. Апаратно-програмний комплекс для дослідження полікристалічних речовин за їх дифракційними спектрами // Тез. доп. Другої міжнар. конф. “КФМ-97”, 14–16 жовт. 1997 р. – Львів: Вид-во наук. тов-ва ім. Т. Г. Шевченка, 1997. – С. 260–261.
5. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3 т. – Москва: Мир, 1987. – [Т. 2]. – С. 321–323.
6. Powder Diffraction File 2003. – PDF – 2, Database Sets 1–89.
7. Caldes M., Michel C., Rouillon T. et al. Novel indates  $Ln_2BaIn_2O_7$ ,  $n = 2$  members of Ruddlesden–Popper family (Ln = La, Nd) // J. Mater. Chem. – 2002. – 12, No 3. – P. 473–476.
8. Shannon R. D. Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and halogenides // Acta Crystallogr. – 1976. – A32, No 5. – P. 751–767.
9. Ruddlesden S. N., Popper P. The compound  $Sr_3Ti_2O_7$  and its structure // Acta Crystallogr. – 1958. – 11, No 1. – P. 54–55.

Київський національний університет  
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 14.11.2013

**Ю. А. Титов, Н. Н. Белявина, В. Я. Марків,**  
член-корреспондент НАН України **Н. С. Слободяник, В. В. Полубинский**

### **Синтез и кристаллическая структура двухслойных индотитанатов $Sr_2LnInTiO_7$**

*Определена протяженность области соединений со слоистой перовскитоподобной структурой (СПС) в ряду двухслойных перовскитов  $Sr_2LnInTiO_7$ . Синтезированы новые индотитанаты  $Sr_2LnInTiO_7$  (Ln – La, Pr, Nd, Sm) при термообработке эквимольных смесей  $Sr_2TO_4 + LnInO_3$  и определена их кристаллическая СПС методом рентгеновской дифракции на порошках. Установлена принадлежность СПС  $Sr_2LnInTiO_7$  (Ln – La, Pr, Nd, Sm) к структурному типу  $BaLa_2In_2O_7$  (пр. гр.  $P4_2/mnm$ ). Значения факторов достоверности  $R_B$  составляют 0,060–0,069. Проанализированы особенности СПС  $Sr_2LnInTiO_7$  и установлены взаимосвязи состав–строение СПС.*

**Y. A. Titov, N. M. Belyavina, V. Ya. Markiv,**  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **M. S. Slobodyanik, V. V. Polubinskii**

### **Synthesis and crystal structure of two-layer indotitanates $Sr_2LnInTiO_7$**

*The extent of a region of compounds with layered perovskite-like structures (LPS) in the row of two-layer perovskites  $Sr_2LnInTiO_7$  is determined. The new indotitanates  $Sr_2LnInTiO_7$  (Ln – La, Pr, Nd, Sm) have been synthesized by heat treatment of equimolar mixtures  $Sr_2TO_4 + LnInO_3$ , and their crystal LPS determined by X-ray powder diffraction. It is found that the LPS of  $Sr_2LnInTiO_7$  (Ln – La, Pr, Nd, Sm) belongs to the  $BaLa_2In_2O_7$  – type structure (sp. gr.  $P4_2/mnm$ ). The final  $R_B$  values are equal to 0.060–0.069. The peculiarities of the two-layer LPS of  $Sr_2LnInTiO_7$  are analyzed, and the composition – constitution correlations of the LPS have been identified.*

В. І. Штомпель, С. В. Рябов, Т. А. Поліщук,  
член-кореспондент НАН України Ю. Ю. Керча

## Про роль хімічної будови аніонного поліелектроліту в формуванні структури поліелектролітних комплексів на основі гідрохлориду полі-4-вінілпіридину

*За допомогою методів широко- і малокутової рентгенографії досліджено структуру двох типів поліелектролітних комплексів на основі Na-солі карбоксиметилцелюлози або Na-солі поліметакрилової кислоти та гідрохлориду ПВП. Показано, що в об'ємі поліелектролітних комплексів на основі Na-солі карбоксиметилцелюлози існує шарувата квазікристалічна структура, тоді як для полімерних систем на основі Na-солі поліметакрилової кислоти характерна переважно аморфна структура, що аналогічна зі структурою вихідного аніонного поліелектроліту.*

Широке застосування поліелектролітних комплексів (ПЕК) у різних промислових галузях (екологія, фармакологія, хімічна промисловість, сільське господарство та ін.) викликало інтенсивне дослідження цих полімерних систем в останні три десятиріччя [1–3]. Домінуюча кількість наукових публікацій присвячена переважно дослідженню фізико-хімічних властивостей ПЕК, які створені на основі різноманітних пар протилежно заряджених слабкого або сильного (чи слабкого і сильного) поліелектролітів (ПЕ), гомополімерного або кополімерного типу, з подібною або різною хімічною будовою [4–6]. Однак відомості про структуру цих полімерних систем у науковій літературі на даний час практично відсутні [1].

У зв'язку з цим, ставилось за мету провести порівняльні дослідження особливостей структури ПЕК, отриманих на основі сильного катіонного ПЕ та одного з двох сильних аніонних ПЕ різної хімічної будови.

Для формування ПЕК використовували:

сильний катіонний ПЕ — гідрохлорид полі-4-вінілпіридину (П4ВП-Cl), який отримували шляхом протонування піридинових циклів полі-4-вінілпіридину (продукт фірми “Sigma-Aldrich”, ММ 60000) за допомогою соляної кислоти, взятої в мольному співвідношенні 1 : 1; сильний аніонний ПЕ: Na-сіль карбоксиметилцелюлози (Na-КМЦ), продукт фірми “Merck”, ступінь заміщення 85%; Na-сіль поліметакрилової кислоти (Na-ПМК), що отримана шляхом нейтралізації груп –COOH поліметакрилової кислоти (продукт фірми “Fluka”, ММ 40000–70000) за допомогою гідроксиду натрію, взятого в мольному співвідношенні 1 : 1.

Формування ПЕК здійснювали шляхом змішування 5%-х водних розчинів П4ВП-Cl і Na-КМЦ або П4ВП-Cl і Na-ПМК, взятих у заданому мольному співвідношенні (в розрахунку на сухий залишок), при 95–97 °С, тобто при температурі розчинення у воді Na-КМЦ. Незалежно від мольного співвідношення аніонного і катіонного ПЕ, при змішуванні їх водних розчинів практично миттєво відбувалось утворення згустків як результат проходження процесів молекулярного “упізнання” і самозбирання протилежно заряджених макромолекул. Після витримання цих згустків впродовж двох годин при 60 °С із них утворювався осад, який являє собою ПЕК [7]. Осад відмивали водою до значення величини рН 6,5–7,0 з подальшим його висушуванням до постійної маси при температурі (22 ± 2) °С. Висушені

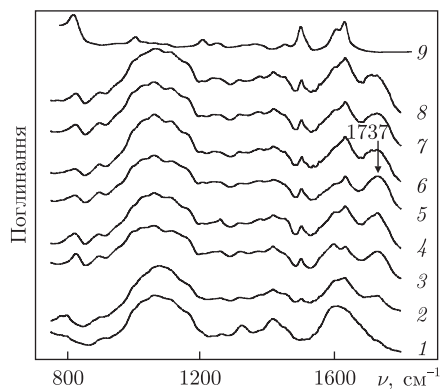


Рис. 1. ІЧ-спектри зразків Na-КМЦ (1) і П4ВП-СІ (9) та отриманих на їх основі ПЕК, у складі яких мольна частка катіонного ПЕ становила: 0,05 (2), 0,12 (3), 0,25 (4), 0,5 (5), 0,8 (6), 0,89 (7), 0,92 (8)

зразки ПЕК досліджували у вигляді порошку, який отримували за допомогою лабораторного кульового млина КМ-1. Мольне співвідношення Na-КМЦ і П4ВП-СІ у ПЕК становило: 17 : 1, 12 : 1, 7 : 1, 3 : 1, 1 : 1, 1 : 4, 1 : 8,5 й 1 : 12, а Na-ПМК і П4ВП-СІ — 3 : 1, 1 : 1 й 1 : 3 відповідно.

Ідентифікацію ПЕК типу Na-КМЦ і П4ВП-СІ виконували методом ІЧ спектроскопії за допомогою ІЧ спектрометра Фур'є Tensor 37 фірми "Bruker".

Структуру вихідних ПЕ та ПЕК досліджували методами широко- і малокутового розсіювання рентгенівських променів. Ширококутові рентгенівські дослідження виконували за допомогою дифрактометра ДРОН-4-07, рентгенооптична схема якого виконана на "проходження" первинного пучка випромінювання через досліджуваний зразок. Малокутові рентгенівські дослідження проводили з використанням малокутової камери КРМ-1, колімацію первинного пучка випромінювання якої виконали методом Краткі. Геометричні параметри камери задовольняли умови "нескінченної висоти колімаційної щілини" [8]. Експериментальні профілі інтенсивності нормували на величину розсіювального об'єму та фактор послаблення первинного пучка досліджуваного зразка полімера.

Усі рентгенографічні дослідження виконували в  $\text{CuK}\alpha$ -випромінюванні, монохроматизованому Ni-фільтром при  $(22 \pm 2)^\circ\text{C}$ .

При проведенні аналізу ІЧ-спектрів Фур'є Na-КМЦ і П4ВП-СІ та отриманих на їх основі ПЕК (рис. 1) встановлено, що на спектрі зразка ПЕК, у складі якого мольна частка П4ВП-СІ становить лише 0,05, з'явилась смуга при  $\nu = 1737 \text{ cm}^{-1}$  (крива 2). Ця смуга проявляється в ІЧ-спектрах усіх ПЕК на основі Na-КМЦ, незалежно від типу катіонного ПЕ (гідрохлориди поліетиленіміну, хітозану та ін.) [9, 10], і є наслідком іонного обміну між аніонним і катіонним ПЕ при формуванні ПЕК із виділенням низькомолекулярної солі [10]. При поступовому зростанні в ПЕК мольної частки катіонного ПЕ інтенсивність смуги при  $(\nu = 1737 \text{ cm}^{-1})$  змінюється екстремально, проходячи через максимум при еквімольному співвідношенні протилежно заряджених ПЕ, тобто для стехіометричного ПЕК.

У зв'язку з цим, важливо дослідити структуру цього типу ПЕК залежно від вмісту в їх складі аніонного і катіонного ПЕ. З наведених на рис. 2 ширококутових рентгенівських дифрактограм вихідних Na-КМЦ і П4ВП-СІ та отриманих на їх основі ПЕК видно, що структура цих полімерних систем істотно відрізняється від структури вихідних ПЕ. Так, у вихідному стані аніонний ПЕ характеризується близьким порядком при трансляції у просторі як глюкозидних циклів основних макроланцюгів, так і їх бокових відгалужень, тобто

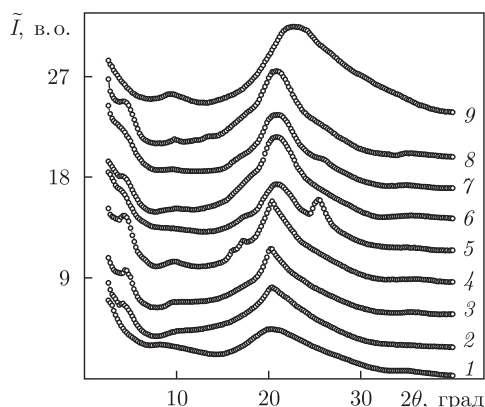


Рис. 2. Ширококутові рентгенівські дифрактограми Na-КМЦ (1) і П4ВП-СІ (9) та ПЕК на їх основі, у складі яких мольна частка катіонного ПЕ становила: 0,05 (2), 0,08 (3), 0,25 (4), 0,50 (5), 0,80 (6), 0,89 (7) і 0,92 (8)

має аморфну структуру, на що вказує прояв на дифрактограмі Na-КМЦ (крива 1) двох асиметричних дифракційних максимумів зі значною кутовою півшириною (аморфних гало), кутове положення ( $2\theta_m$ ) яких становить  $20,0^\circ$  й  $8,7^\circ$  відповідно. Виходячи із кількості атомів (електронів) у глюкозидному циклі і метилкарбоксилатному боковому відгалуженні, встановлено, що більш інтенсивне аморфне гало ( $2\theta_m \approx 20,0^\circ$ ) характеризує близьку упорядкованість фрагментів основних макроланцюгів, а менш інтенсивне ( $2\theta_m \approx 8,7^\circ$ ) — близький порядок при розміщенні у просторі фрагментів метилкарбоксилатних ( $-\text{CH}_2\text{COO}^-\text{Na}^+$ ) бокових відгалужень. У свою чергу, катіонний ПЕ також має близьке упорядкування при трансляції у просторі як основних макромолекулярних ланцюгів, так і протонованих піридинових циклів. На це вказує прояв двох дифракційних максимумів дифузного типу різної інтенсивності і кутової півширини на дифрактограмі П4ВП-СІ. Проведений аналіз кількості атомів (електронів) в основному макроланцюзі та боковому відгалуженні цього ПЕ дозволив встановити, що малоінтенсивний максимум при  $2\theta_m \approx 9,4^\circ$  характеризує близьке упорядкування основних макроланцюгів, а основний за інтенсивністю максимум при  $2\theta_m \approx 22,7^\circ$  — їх бокових відгалужень (протонованих піридинових циклів).

При проведенні аналізу ширококутових рентгенівських дифрактограм зразків ПЕК (рис. 2) встановлено, що, незалежно від мольного співвідношення аніонного і катіонного ПЕ в складі цих полімерних систем, має місце прояв малокутового (при  $2\theta_m \approx 4,4^\circ$ ) дифракційного максимуму дискретного типу значної інтенсивності, що вказує на існування в об'ємі ПЕК шаруватих наноструктур, утворених електростатично зв'язаними протилежно зарядженими макромолекулами ПЕ. Виходячи із кутового положення ( $2\theta_m$ ) цього дифракційного максимуму на дифрактограмах ПЕК, відстань ( $d$ ) між базальними площинами (між шарами протилежно заряджених макромолекул) з індексами Міллера (001), згідно з рівнянням Брегга:

$$d = \lambda(2 \sin \theta_{\max})^{-1},$$

де  $\lambda$  — довжина хвилі характеристичного рентгенівського випромінювання, що становить 2,0 нм. Оцінку ефективного розміру кристалітів у напрямі, перпендикулярному площині реєстрації, утворених базальними шарами (площинами) макромолекул, проводили методом Шерера [7]:

$$L = K\lambda(\beta \cos \theta_{\max})^{-1},$$



де  $K = 0,9$  (при невідомій формі кристалітів);  $\beta$  — кутова півширина (ширина на половині висоти) дифракційного максимуму при  $2\theta_m \approx 4,4^\circ$ . Розрахунки показали, що  $L \approx 4,0$  нм, тобто кристаліти утворені трьома шарами протилежно заряджених макромолекул.

Крім цього, з аналізу рентгенівських дифрактограм зразків ПЕК виявили, що навіть при незначній мольній частці (0,05) катіонного ПЕ у ПЕК, структура цих полімерних систем є квазікристалічною, яка істотно відрізняється від аморфної структури вихідних Na-КМЦ і П4ВП-С1. На це вказує прояв (на фоні уявного аморфного гало при  $2\theta_m \sim 20\text{--}21^\circ$ ) дискретного дифракційного максимуму при  $2\theta_m = 20,4^\circ$  зі зростанням мольної частки катіонного ПЕ від 0,05 до 0,25 у складі ПЕК, а у випадку більш високої концентрації цього ПЕ — має місце прояв також дифракційних максимумів при  $2\theta_m \sim 17^\circ$  і  $2\theta_m \sim 25,5^\circ$ . Як показала оцінка [7], ефективний розмір кристалітів  $L$  (визначення проводили по кутовій півширині максимуму при  $2\theta_m = 25,5^\circ$  на дифрактограмі зразка стехіометричного ПЕК, в об'ємі якого реалізується еквііонний баланс (крива 5)) становить близько 4,6 нм. Це вказує на те, що формування квазікристалічної структури в об'ємі всіх зразків ПЕК є наслідком утворення шаруватої наноструктури в результаті кооперативних електростатичних взаємодій між протилежно зарядженими макромолекулами ПЕ.

Аналізуючи профілі інтенсивності малокутового розсіювання рентгенівських променів вихідних Na-КМЦ, П4ВП-С1 та ПЕК, отриманих на їх основі, представлених як у вигляді графіків залежності  $\tilde{I}$  від  $2\theta$ , так і залежності  $s^3\tilde{I}(s)$  від  $s^3$  (графіків Руланда [11]), де  $s = \lambda^{-1}(2 \sin \theta)$  — величина хвильового вектора в просторі зворотної ґратки,  $2\theta$  — кут розсіювання рентгенівських променів,  $\tilde{I}$  — інтенсивність розсіювання при щільній колімації первинного пучка випромінювання, було встановлено, що лише в об'ємі зразка стехіометричного ПЕК, при формуванні якого використовували еквімольне співвідношення аніонного і катіонного ПЕ, контраст електронної густини  $\Delta\rho \neq 0$ , тобто має місце гетерогенність структури. При проведенні оцінки ефективного розміру мікрообластей гетерогенності, згідно з методом [11], шляхом визначення такого структурного параметра, як діапазон гетерогенності ( $l_p$ ), що безпосередньо пов'язаний із середнім розміром мікрообластей ( $\langle l_1 \rangle$ ,  $\langle l_2 \rangle$ ) в об'ємі двофазової системи:

$$l_p^{-1} = \langle l_1 \rangle^{-1} + \langle l_2 \rangle^{-1},$$

встановлено, що величина  $l_p \approx 40$  нм, тобто є значно більшою, ніж розмір шаруватих квазікристалічних наноструктур. Це зумовлено тим, що параметр  $l_p$  характеризує як середній розмір квазікристалічних наноструктур, так і аморфних мікрообластей в об'ємі стехіометричного ПЕК.

Аналіз ширококутових рентгенівських дифрактограм ПЕК на основі Na-ПМК і П4ВП-С1 (рис. 3) показав, що на відміну від вищеописаних ПЕК, в яких сильним аніонним ПЕ була Na-сіль карбоксиметилцелюлози, в цих полімерних системах шарувата структура відсутня, при цьому вони мають переважно аморфну структуру. Так, прояв двох дифракційних максимумів дифузного типу (аморфних гало) різної інтенсивності при  $2\theta_m \approx 15,3^\circ$  і  $2\theta_m \approx 31,2^\circ$  на дифрактограмі Na-солі поліметакрилової кислоти (див. криву 1) вказує на розгалужену будову цього сильного аніонного ПЕ. З аналізу кількості атомів (електронів) в основному макроланцюзі та в бокових відгалуженнях ( $-\text{CH}_3$  й  $-\text{COO}^-\text{Na}^+$ ) зроблено висновок, що основний за інтенсивністю дифракційний максимум (при  $2\theta_m \approx 15,3^\circ$ ) характеризує близьке упорядкування при трансляції у просторі бокових відгалужень, а вторинний максимум ( $2\theta_m \approx$



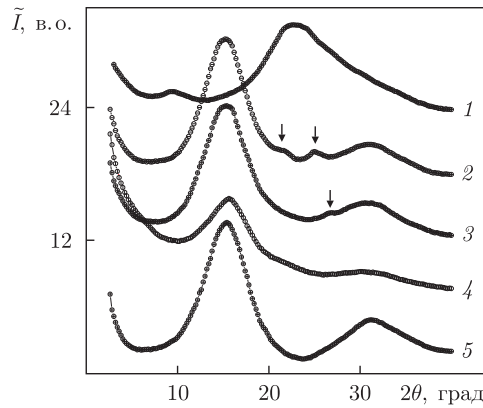


Рис. 3. Ширококутові рентгенівські дифрактограми Na-ПМК (1) і П4ВП-С1 (5) та ПЕК на їх основі, у складі яких мольна частка катіонного ПЕ становила: 0,25 (2), 0,50 (3) і 0,75 (4)

$\approx 31,2^\circ$ ) — близький порядок при розміщенні в просторі фрагментів основних макроланцюгів Na-ПМК.

Встановлено, що при домінуючій кількості (0,75 моль) сильного катіонного ПЕ в ПЕК ширококутова рентгенівська дифрактограма цієї полімерної системи має вигляд, аналогічний з вказаною дифрактограмою вихідного сильного аніонного ПЕ — Na-ПМК, при цьому прояв катіонного ПЕ (П4ВП-С1) практично повністю відсутній (див. криві 4, 5 на рис. 3). На цей поліелектроліт вказує прояв двох дифракційних максимумів незначної інтенсивності (вказані стрілкою) при  $2\theta_m \approx 21,4^\circ$  і  $2\theta_m \approx 25,1^\circ$ , кутова півширина яких характеризує їх як дискретні, що свідчить про наявність в об'ємі цього зразка ПЕК мікробластей із дальнім упорядкуванням фрагментів макроланцюгів протилежно заряджених ПЕ, тобто кристалітів. Як показала оцінка [7], рівень кристалічності цього зразка ПЕК становить близько 7–9%, а ефективний розмір кристалітів  $L \approx 4$  нм (для оцінки  $L$  використовували кутову півширину дифракційного максимуму при  $2\theta_m \approx 25,1^\circ$ ).

Зразок стехіометричного ПЕК, для отримання якого використовували еквімольне співвідношення Na-ПМК і П4ВП-С1, також має рентгенівську дифрактограму, аналогічну з вихідним сильним аніонним ПЕ (див. криві 3, 5 на рис. 3), при цьому на дифрактограмі є прояв також малоінтенсивного дифракційного максимуму дискретного типу (вказаний стрілкою) при  $2\theta_m \approx 26,7^\circ$ , який характеризує існування досить незначної кількості елементів дальнього порядку в об'ємі цього зразка ПЕК.

Звертає на себе увагу рентгенівська дифрактограма зразка ПЕК, що містить у своєму складі лише 0,25 моль катіонного ПЕ (0,75 моль аніонного ПЕ), на якій існує менш чіткий прояв аморфної структури Na-ПМК, порівняно з описаними вище рентгенівськими дифрактограмами двох зразків ПЕК, у складі яких вміст цього ПЕ був меншим (0,50 і 0,25 моль). На це вказує менша інтенсивність дифракційних максимумів дифузного типу (аморфних гало) при  $2\theta_m \approx 15,3^\circ$  і  $2\theta_m \approx 31,2^\circ$ , що характеризують аморфну структуру цього аніонного ПЕ, а також прояв лінійного зменшення інтенсивності в області кутів розсіювання ( $2\theta$ ) від  $19,7$  до  $25,6^\circ$ , в якій є прояв дискретних дифракційних максимумів на дифрактограмі зразка ПЕК, у складі якого вміст катіонного ПЕ становить 0,75 моль (див. криві 4, 2 на рис. 3). Саме це дозволяє характеризувати вказане лінійне зменшення інтенсивності як накладення двох близьких за кутовим положенням дифракційних максимумів дискретного типу, тобто говорити про наявність у зразку ПЕК, у складі якого міститься 0,25 моль катіонного ПЕ,

мікрообластей, що мають дальній порядок при розміщенні в просторі фрагментів макроланцюгів Na-ПМК і П4ВП-С1.

За даними малокутової рентгенографії, всі зразки ПЕК цього типу мають мікрогетерогенну структуру. Проведена за методом роботи [11] оцінка ефективного розміру мікрообластей гетерогенності ( $l_p$ ) показала, що величина  $l_p \approx 30\text{--}35$  нм, при цьому характер розміщення цих мікрообластей в об'ємі зразків ПЕК є стохастичним.

Таким чином, проведені структурні дослідження двох типів ПЕК на основі П4ВП-С1 та одного з сильних аніонних ПЕ — Na-КМЦ або Na-ПМК виявили існування значної залежності структури від хімічної будови аніонного ПЕ. Показано, що в об'ємі ПЕК на основі Na-КМЦ формується шарувата квазікристалічна наноструктура, шари якої утворені протилежно зарядженими макроланцюгами, при цьому контурна довжина бокових відгалужень, що містять катіоний і аніонний заряди, є однаковою з відстанню  $d_{001}$  між базальними площинами (шарами). Для цього типу ПЕК мікрогетерогенна структура формується лише при еквімолярному співвідношенні аніонного і катіонного ПЕ з ефективним розміром мікрообластей гетерогенності близько 40 нм.

При використанні Na-ПМК для створення ПЕК в об'ємі цих полімерних систем формується переважно аморфна структура, яка є аналогічною зі структурою вихідного аніонного ПЕ, на фоні якої є прояв елементів дальнього порядку (кристалітів), при цьому максимальний рівень кристалічності не перевищує 9%. Зазначимо, що всі зразки цього типу ПЕК виявляють мікрогетерогенну структуру із ефективним розміром мікрообластей гетерогенності 30–35 нм.

1. Кабанов В. А. Полиэлектролитные комплексы в растворе и в конденсированной фазе // Успехи химии. – 2005. – **74**, № 1. – С. 5–23.
2. Краюхина М. А., Самойлова Н. А., Ямсков И. А. Полиэлектролитные комплексы хитозана: формирование, свойства и применение // Успехи химии. – 2008. – **77**, № 9. – С. 854–869.
3. Зезин А. Б., Рогачева В. Б. Полиэлектролитные комплексы // Успехи химии и физики полимеров / Под ред. А. А. Берлина, В. А. Кабанова, З. А. Роговина. – Москва: Химия, 1973. – С. 3–30.
4. Лысенко Е. А., Челушкин П. С., Бронич Т. К. и др. Получение и свойства мицеллярных полиэлектролитных комплексов на основе амфифильных блок-сополимеров // Структура и динамика молекуляр. систем. – 2003. – Вып. 10, ч. 2. – С. 110–115.
5. Winkler R. G. Universal properties of complexes formed by two oppositely charged flexible polyelectrolytes // New J. Phys. – 2004. – **6**, No 11. – P. 2–9.
6. Кобилінський С. М., Штомпель В. І., Рябов С. В., Керча Ю. Ю. Структура і сорбційні властивості полімерних систем на основі пектину та поліетиленіміну // Укр. хим. журн. – 2010. – **76**, № 11./12. – С. 64–70.
7. Yi J. Z., Goh S. H. Miscibility of poly(methacrylic acid)/poly(4-vinylpyridine) blends and complexes investigated by high-resolution solid-state  $^{13}\text{C}$  NMR // Polymer. – 2001. – **42**, No 24. – P. 9313–9316.
8. Kratky O., Pilz I., Schmitz P. Absolute intensity measurement of small-angle x-ray scattering by means of a standard sample // J. Coll. Int. Sci. – 1966. – **21**, No 1. – P. 24–34.
9. Rosca C., Popa M. I., Lisa G., Chitanu G. C. Interaction of chitosan with natural or synthetic anionic polyelectrolytes. I. The chitosan-carboxymethylcellulose complex // Carbohydr. Polym. – 2005. – **62**, No 1. – P. 35–41.
10. Штомпель В. І., Саса Б. С., Рябов С. В. та ін. Поліелектролітні комплекси на основі Na-карбоксиметилцелюлози і поліетиленімінхлориду: ідентифікація та структура // Полімер. журн. – 2010. – **32**, № 3. – С. 204–209.
11. Perret R., Ruland W. Eine verbesserte Auswertungsmethode für die Röntgenkleinwinkelstreuung von Hochpolymeren // Kolloid Z. – Z. Polymere. – 1971. – **B. 247**, No 1./2. – S. 835–843.

**В. И. Штомпель, С. В. Рябов, Т. А. Полищук,**  
член-корреспондент НАН Украины **Ю. Ю. Керча**

**О роли химического строения анионного полиэлектролита  
в формировании структуры полиэлектролитных комплексов  
на основе гидрохлорида поли-4-винилпиридина**

*С помощью методов широко- и малоугловой рентгенографии исследована структура двух типов полиэлектролитных комплексов на основе Na-соли карбоксиметилцеллюлозы или Na-соли полиметакриловой кислоты и гидрохлорида ПВП. Показано, что в объеме полиэлектролитных комплексов на основе Na-соли карбоксиметилцеллюлозы существует слоистая квазикристаллическая структура, тогда как для полимерных систем на основе Na-соли полиметакриловой кислоты характерна преимущественно аморфная структура, аналогичная со структурой исходного анионного полиэлектролита.*

**V. I. Shtompel, S. V. Riabov, T. A. Polischuk,**  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **Yu. Yu. Kercha**

**The role of the chemical structure of an anionic polyelectrolyte on the  
formation of a structure of polyelectrolyte complexes based on  
poly-(4-vinylpyridine) hydrochloride**

*By using the methods of wide- and small-angle x-ray scattering, the structures of two types of polyelectrolyte complexes based on Na-salt carboxymethylcellulose or Na-salt of polymethacrylic acid and hydrochloride are investigated. It is shown that, in a volume of polyelectrolyte complexes based on Na-salt carboxymethylcellulose, a layered quasicrystalline structure is formed, whereas the polymer systems based on Na-salt of polymethacrylic acid have predominantly an amorphous structure similar to that of the initial anionic polyelectrolyte.*



УДК 581.144.4.:58.001

А. Н. Берестяная

**Анализ методов оценки метилирования остатков  
цитозина на примере ДНК монокарпического растения  
*Linum usitatissimum***

*(Представлено академиком НАН Украины Д. М. Гродзинским)*

*Рассмотрены преимущества и недостатки наиболее распространенных методов анализа эпигенома растений. Проанализированы методы определения метилирования ДНК в контексте радиобиологических исследований. Приведены данные по применению этих методов на примере исследования модификации ДНК монокарпического растения *Linum usitatissimum*, облученного разными дозами ионизирующего излучения.*

Факторы окружающей среды, в частности антропогенные загрязнители, ультрафиолетовая и ионизирующая радиация, могут индуцировать ряд патологических процессов в живом организме. Для оценки восприимчивости генома растений к влиянию повреждающих факторов ведется поиск молекулярных мишеней, ответственных за возникновение патологических состояний. Исследование генотоксических влияний включает анализ статуса эпигенома. Стрессовые сигналы окружающей среды изменяют программу развития растительного организма посредством воздействия на эпигеном. Эпигенетическая регуляция осуществляется путем дифференциального метилирования цитозина в специфических участках ДНК. Учитывая возрастание абиотического стресса, в том числе ионизирующей радиации, актуальным на сегодняшний день является исследование эпигеномных событий в клетках облученных растений и выбор наиболее оптимальных методов для оценки статуса метилирования ДНК [1, 2].

Методы изучения метилирования не универсальны для ДНК разных организмов. Широкий набор подходов в исследовании эпигенома зависит от особенностей организации объекта и целей исследования. Существует несколько наиболее распространенных методов анализа метилирования, одни из которых направлены на учет количества метилцитозина, другие — на оценку статуса модификации специфических участков генома, соответственно, часть методов сосредоточена на отдельных генах, другие — на широких массивах генома.

Весьма популярным методом изучения растительного эпигенома остается метод гидролиза ДНК с помощью чувствительных к метилированию цитозина эндонуклеаз рестрикции.

---

© А. Н. Берестяная, 2014

Это так называемый метод рестрикционного сканирования генома, основанный на обработке ДНК несколькими рестриктазами, и разделении полученных рестрикционных фрагментов путем электрофореза. Для анализа статуса метилирования CpG-динуклеотидов, находящихся в сайте узнавания, используют пары рестриктаз-изошизомеров, которые распознают один и тот же сайт ДНК, но различаются по чувствительности к метилированию остатков цитозина (HpaII и MspI, TaqI и Sau3AI, SmaI и XmaI). В сочетании с гибридизацией по Саузерну данный метод позволяет установить, модифицирован или нет сайт узнавания соответствующих рестриктаз. Иногда после проведения рестрикции ограничиваются только электрофоретическим анализом различий фрагментов в геле, что позволяет устанавливать наличие метилирования сайта узнавания соответствующих рестриктаз в суммарной ДНК, а не в конкретных генах. Данный метод ориентирован на анализ статуса метилирования больших фрагментов тотальной ДНК и обнаружение множества новых CpG-островков генов. Несмотря на простоту исполнения, недостаток метода состоит в том, что отсутствие надлежащего контроля над прохождением рестрикции может привести к неполному расщеплению ДНК, а неточности в проведении электрофореза могут вызвать неверное истолкование результатов исследования [3].

Применительно к исследованию эпигенома для поиска модифицированных участков ДНК активно используется группа методов, основанная на ПЦР. Существует множество вариаций ПЦР, различающихся по таким параметрам, как концентрация и тип реагентов, температура и время отжига, количество циклов амплификации. Согласно поставленным задачам проводится разработка способов оптимизации условий реакции [4].

Ряд ПЦР-основанных методов сравнения геномов растений и животных показал, что у тех и у других наиболее метилированы повторяющиеся элементы. Метилированные остатки цитозина неравномерно распределены в ДНК, чаще всего они присутствуют в гетерохроматиновых участках. Модифицированные остатки цитозина сконцентрированы преимущественно в умеренно и часто повторяющихся последовательностях, расположенных в центромерах, теломерах и областях ядрышкового организатора. Самый высокий уровень ферментативной модификации имеют гены рибосомных РНК. Также много метилированных остатков цитозина в ДНК транспозонов и ретроэлементов. Модификация и расположение мобильных генетических элементов в области гетерохроматина делает их транскрипционно неактивными [5, 6]. Предположительно, ферментативно модифицированные остатки цитозина отсутствуют в большинстве экзонов растений. В эндогенных генах модифицируются 5'-области генов. Трансгены, в свою очередь, несут паттерны метилирования как в промоторных, так и в кодирующих областях [7, 8].

Одним из современных наиболее применяемых методов изучения эпигенома считается метод метилчувствительной ПЦР (МЧ-ПЦР), или, как принято называть его в зарубежных источниках, MSAP-анализ (methylation-sensitive amplification polymorphism). Данный метод является модификацией метода анализа полиморфизма амплифицированных фрагментов, он основан на принципе использования энзиматического гидролиза с помощью рестрикционных эндонуклеаз, чувствительных к метилированию остатков цитозина, и дальнейшей ПЦР со специфическими CG-богатыми праймерами. Когда имеются модифицированные основания во фрагменте ДНК, то гидролиза метилчувствительной рестриктазой не происходит и данный фрагмент будет амплифицироваться экспоненциально. Если исследуемый фрагмент ДНК не содержит метилированных оснований, гидролиз проходит полностью и продукт ПЦР данного фрагмента отсутствует на электрофореграмме (рис. 1). Данный метод эффективен для исследования промоторных CpG-островков, содержащих множество

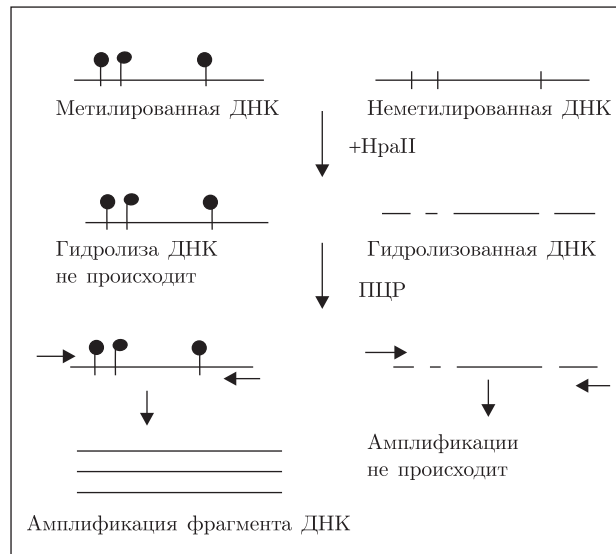


Рис. 1. Схема MSAP-анализа

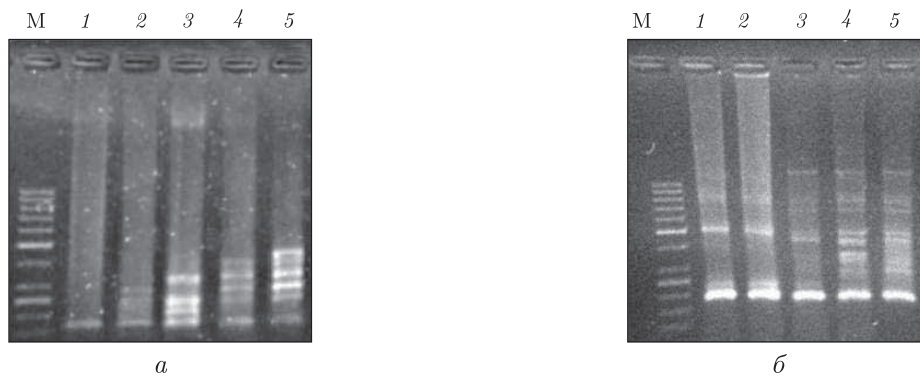


Рис. 2. MSAP-анализ с CG-богатыми праймерами: *а* — анализ неспецифических GC-участков; *б* — анализ GC-участков во фрагменте гена рибосомной РНК.

1 — необлученный контроль; 2 — доза 10 Гр; 3 — доза 20 Гр; 4 — доза 50 Гр; 5 — доза 100 Гр

сайтов узнавания метилчувствительных рестриктаз. MSAP позволяет проводить полногеномный анализ статуса метилирования и высокочувствительную детекцию интенсивности модификации CpCpGpG-мотивов в определенных фрагментах генов, а также наблюдать изменения характера метилирования ДНК в динамике [8, 9].

В своих исследованиях мы применяли метод MSAP-анализа (МЧ-ПЦР) для исследования изменения паттернов метилирования под действием облучения ионизирующей радиацией (рис. 2). С целью оптимизации метода на этапе ферментативной обработки использовали несколько типов рестриктаз. Рестриктию суммарной ДНК проводили в два этапа. На первом этапе ДНК исследуемых образцов инкубировали с ферментом рестрикции EcoRI, который не содержал в составе своего сайта узнавания CpG-динуклеотиды, а узнавал и расщеплял редко встречаемую последовательность 5'-GAATTC-3'. Чаще всего на этом этапе используется фермент именно с гексануклеотидным сайтом узнавания ДНК. Смысл этапа — расщепление ДНК на более мелкие фрагменты, что делает их более доступными для действия метилчувствительных рестриктаз. Рестриктазы брали в реакцию с 10-кратным



избытком (1 мкг ДНК — 10 ед. акт. фермента), инкубировали в соответствующих буферах при температурах, указанных производителем реагента, в течение 16 ч. На втором этапе отбирали половину обработанной ДНК и инкубировали с той или иной рестриктазой, чувствительной к статусу метилирования CpG-динуклеотидов в составе своего сайта рестрикции. Добавляли половину исходного количества фермента (1 мкг — 5 ед. акт. фермента) и инкубировали в течение 2–3 ч при температурах, указанных производителем. В дальнейшем анализе использовали аликвоту рестрицированной ДНК в амплификации со специфическими и неспецифическими праймерами. По условиям MSAP-анализа праймеры должны содержать на концах CG-повторы, фланкирующие исследуемый участок, т. е. должны быть обогащены CG-парами. Праймеры подбирали в соответствии с той последовательностью, эпигеном которой хотели проанализировать. В нашем случае это были гены рРНК, имеющие множество вариабельно метилируемых CpG-динуклеотидов. Так, для анализа генома использовали неспецифические CG-богатые праймеры, для анализа фрагмента гена конструировали специфические CG-богатые праймеры. Последующая ПЦР продуктов рестрикции позволяет установить расположение метилированных сайтов в выбранном участке генома. Различия в продуктах реакции объясняются наличием метилирования ДНК по сайту, узнаваемому метилчувствительной рестриктазой.

Метилчувствительная рестриктаза разрезает сайты, в которых отсутствует метилирование, и оставляет неизменными те сайты, в которых присутствует модификация. В дальнейшем делают секвенирование полученных продуктов ПЦР на секвенаторе для подробного описания метилирования каждого сайта исследуемого участка. При отсутствии возможности проводить сиквенс обходятся визуализацией продуктов реакции в агарозном или полиакриламидном гелях на УФ-трансиллюминаторе [10].

На рис. 2 показаны примеры MSAP-анализа со специфическими и неспецифическими CG-богатыми праймерами. Наличие дополнительных продуктов амплификации в облученных образцах указывает на прохождение метилирования под влиянием облучения. О том, как долго длился вызванный облучением эпигенетический эффект, можно определить при дальнейшем исследовании эпигенома на последующих стадиях онтогенеза [11].

Недостаток метода состоит в ограниченности только CpG-динуклеотидами. Однако эти динуклеотиды, попадающие в сайт узнавания, могут быть успешно проанализированы с помощью данного метода. Достоинством метода является высокая чувствительность, позволяющая анализировать метилированные аллели при наличии аллелей дикого типа. Кроме того, MSAP-анализ прост и удобен в применении, менее затратен по сравнению с методами, включающими бисульфитную обработку ДНК [12].

Еще одним методом, основанным на ПЦР, является метод метилспецифической ПЦР (МС-ПЦР), позволяющий оценить статус метилирования индивидуальных CpG-островков. В частности, обнаружить в составе отдельных генов и их промоторов те CpG-динуклеотиды, модификация которых способна подавить транскрипцию соответствующего гена. Суть метода заключается в том, что исследуемую ДНК подвергают обработке бисульфитом натрия, который дезаминирует немодифицированный цитозин, превращая его в урацил, в то время как метилированные остатки цитозина остаются неизменными и устойчивыми к данной обработке. Сайты узнавания рестриктаз в неметилированных последовательностях претерпевают модификацию. В ходе последующей ПЦР урацил заменяется на тимин, а неметилированный цитозин конвертируется в тимин [13].

Важным условием метода МС-ПЦР является полная денатурация ДНК, полная конверсия неметилированных остатков цитозина с минимальными потерями ДНК в процессе



многостадийной подготовки образца. Этапы бисульфитной обработки включают рестрикцию, денатурацию, бисульфитную конверсию, очистку, остановку конверсии и осаждение ДНК. Количество суммарной ДНК должно быть в пределах 500 нг – 2 мкг.

Перед подготовкой к бисульфитной обработке суммарную ДНК, как и на первом этапе метода MSAP-анализа, обрабатывают эндонуклеазой рестрикции. Рестриктазу подбирают так, чтобы исследуемая последовательность не содержала сайтов узнавания этой рестриктазы, а была фланкирована ими. Данный этап, так же как и в MSAP, занимает 12–16 ч. Затем продукты рестрикции ДНК очищают от остатков рестриктазы фенол-хлороформной депротеинизацией для предотвращения ингибирования бисульфитной конверсии. Денатурируют ДНК, поскольку конверсия возможна только в одноцепочечной ДНК. Инкубируют 30 мин при 37 °С с NaOH 0,3 М или при 97 °С 5 мин, с последующим резким охлаждением на льду. На этапе бисульфитной конверсии цитозина используют раствор, содержащий бисульфит натрия и гидрохинон в концентрации 3,5 М и 0,5 мМ соответственно. В течение 8 ч инкубируют при 50–60 °С. После этого проводят десульфонацию ДНК, что предотвращает ингибирование в ходе дальнейшей реакции; осаждают этанолом. Затем продельвают ПЦР и секвенирование, что дает возможность точно картировать данные о количестве метилцитозина в геноме.

Секвенирование позволяет определить модификацию всех CpG-динуклеотидов исследуемой области. Однако часто обходятся методами, не уступающими по эффективности секвенированию. Одним из таких методов является метилспецифическая ПЦР, позволяющая достоверно оценить метилирование CpG-динуклеотидов. ПЦР проводят с праймерами, соответствующими метилированной и неметилированной последовательности изучаемого участка ДНК. О метилировании судят исходя из того, с какой парой праймеров прошла амплификация. Специфические праймеры конструируют так, чтобы на 3'-конце каждый содержал хотя бы один CpG-динуклеотид. Преимущество метода состоит в том, что целостность ДНК поддерживается, однако необходимо добиться полноты прохождения конверсии неметилированных остатков цитозина, чтобы свести к минимуму ошибки, ведущие к появлению ложноположительных результатов. Основным недостатком является необходимость строгого подбора условий ПЦР и конструкции множества пар праймеров, которые избирательно амплифицируют последовательности. Данным методом сложно исследовать большие массивы ДНК. Но в сочетании с real-time ПЦР метод позволяет определить метилирование отдельных CpG-пар [14, 15].

В эпигенетике растений метод MS-ПЦР на основе бисульфитной конверсии сыграл важную роль. С помощью бисульфитного секвенирования генома было определено, что метилирование происходит не только в CpG и CpNpG симметричных мотивах, но и в асимметричных CpNpN-мотивах эндогенных генов растений. Метилирование цитозина в асимметричных последовательностях ДНК растений происходит при *de novo* РНК-направленном метилировании. Асимметричные сайты часто метилируются в мобильных генетических элементах. Модификация этих последовательностей сопровождается сайленсингом транскриптов и транспозонов [1].

Дифференциальное метилирование генов определяют также с помощью рестрикционного анализа ПЦР-продуктов. Это метод COBRA (combined bisulfate restriction analysis), основанный на использовании, как и в предыдущем случае, бисульфита натрия для модификации неметилированных остатков цитозина. После бисульфитной обработки ДНК проводят амплификацию гена, эпигенетический статус которого хотят исследовать с праймерами, фланкирующими один или несколько CpG-динуклеотидов. Затем рестрицируют

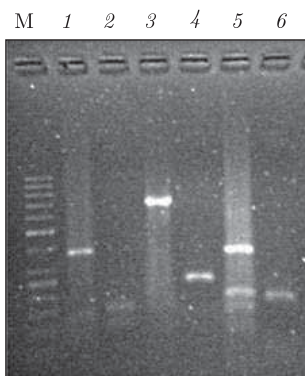


Рис. 3. Пример метода COBRA для анализа продукта амплификации ITS гена рРНК разными метилчувствительными рестриктазами.

1 — MspI; 2 — HpaII; 3 — продукт амплификации; 4 — DpnI; 5 — EcoRV; 6 — SmaI

продукт амплификации метилчувствительными рестриктазами. В зависимости от состояния модификации CpG-динуклеотидов во время бисульфитной обработки образуются или исчезают сайты узнавания различных рестриктаз. Это можно проверить путем электрофоретического анализа продуктов рестрикции ампликонов. Недостатком метода является необходимость подбора рестриктаз для каждой CpG-пары в составе сайта рестрикции. Кроме того, неполная конверсия остатков цитозина отражается на ПЦР, есть угроза получения ложноположительных результатов. Результаты анализа детектируют на секвенаторе или, при отсутствии таковых возможностей, ограничиваются визуализацией продуктов реакции в агарозном геле [3, 14]. На рис. 3 показан пример рестрикционного анализа ПЦР-продукта последовательности ITS (internal transcribed spacer) гена рРНК с помощью метилчувствительных рестриктаз.

Применение того или иного метода основывается на задачах исследования, может обладать как достоинствами, так и недостатками. Методы, ограничивающиеся применением эндонуклеаз рестрикции и электрофоретического анализа, недостаточно точны по причине вероятного неполного расщепления ДНК. Методы, основанные на бисульфитной обработке, плохо воспроизводимы, дают неточности из-за сложностей в проведении полной денатурации, конверсии и очистки геномной ДНК. Некоторые ПЦР-основанные методы, в частности МС-ПЦР, не всегда оправданы из-за затратности, поскольку требуют большого количества разнообразных праймеров, подбора ряда рестриктаз, обязательного использования секвенатора и длительного подбора условий реакции. Наиболее простым и доступным является метод MSAP-анализа. Он не нуждается в бисульфитной обработке ДНК, ограничивается малым набором рестриктаз и праймеров. Данные анализа картируются без секвенатора и вполне воспроизводимы. Согласно результатам нашего исследования, метод MSAP-анализа является наиболее удобным и доступным для определения паттернов метилирования в ДНК растений, облученных ионизирующей радиацией.

1. Ming C., Shaolei L., Meng Y. Epigenetic performers in plants // *Development, Growth and Differentiation*. – 2010. – **52**, No 6. – P. 555–566.
2. Nawkar G. M., Maibam P., Park L. H. et al. UV-Induced Cell Death in Plants // *Int. J. Mol. Sci.* – 2013. – **14**, No 1. – P. 1608–1628.
3. Brownstein M. J., Khodursky A. *Functional genomics (methods and protocols)*. – Totowa: Humana Press, 2003. – 500 p.

4. Lee T., Zhai J., Meyers B. Conservation and divergence in eukaryotic DNA methylation // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. – 2010. – **107**, No 20. – P. 9027–9028.
5. Yang C., Zhang M., Niu W. et al. Analysis of DNA Methylation in Various Swine Tissues // Plos One. – 2011. – **6**, No 1. – P. 1–9.
6. Wu R., Wang X., Lin Y. et al. Inter-Species Grafting Caused Extensive and Heritable Alterations of DNA Methylation in Solanaceae Plants // PloS One. – 2013. – **8**, No 4. – P. 1–11.
7. Keyte A., Percifield R., Liu B. et al. Intraspecific DNA Methylation Polymorphism in Cotton (*Gossypium hirsutum* L.) // J. Heredity. – 2006. – **97**, No 5. – P. 444–450.
8. Lu Y., Rong T., Cao M. Analysis of DNA methylation in different maize tissues // J. genet. and genom. – 2008. – **35**. – P. 41–48.
9. Wojdacz T. K., Dobrovic A., Hansen L. L. Methylation-sensitive high-resolution melting // Nature Protocols. – 2008. – **3**, No 12. – P. 1903–1908.
10. Shen L., Waterland R. A. Methods of DNA methylation analysis // Curr. Opin. Clin. Nutr. Metab. Care. – 2007. – **10**. – P. 576–581.
11. Берестяная А. Н. Влияние острого рентгеновского облучения на эпигеном в ходе онтогенеза *Linum usitatissimum* // Доп. НАН України. – 2013. – № 9. – С. 158–164.
12. Cao D., Xiang G., Liu J. Methylation sensitive amplified polymorphism (MSAP) reveals that alkali stress triggers more DNA hypomethylation levels in cotton (*Gossypium hirsutum* L.) roots than salt stress // African J. Biotechnol. – 2011. – **10**, No 82. – P. 18971–18980.
13. Claus R., Wilop S., Hielscher T. et al. A systematic comparison of quantitative high-resolution DNA methylation analysis and methylation-specific PCR // Epigenetics. – 2012. – **7**, No 7. – P. 772–780.
14. Fouse S. D., Nagarajan R. P., Costello J. F. Genome-scale DNA methylation analysis // Epigenomics. – 2010. – **2**, No 1. – P. 105–117.
15. Колупаев В. Е. Преимущества методов ПЦР в реальном времени // Лаб. медицина. – 2002. – № 5. – С. 110–112.

Институт клеточной биологии и генетической инженерии НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 04.10.2013

**А. М. Берестяна**

### **Аналіз методів оцінки метилування залишків цитозину на прикладі ДНК монокарпічної рослини *Linum usitatissimum***

*Розглянуто переваги та недоліки найбільш поширених методів аналізу епігеному рослин. Проаналізовано методи визначення метилування ДНК у контексті радіобіологічних досліджень. Наведено дані щодо застосування цих методів на прикладі дослідження модифікації ДНК монокарпічної рослини *Linum usitatissimum*, опроміненої різними дозами іонізуючого випромінювання.*

**A. N. Berestyayana**

### **The analysis of methods for assessing the methylation of cytosine residues in the DNA sample of monocarpic plant *Linum usitatissimum***

*The advantages and disadvantages of the most popular methods of analyzing the epigenome of plants are considered. The methods of determination of the DNA methylation in the context of radio-biological researches are analyzed. Data on applications of the methods described to the study of a DNA modification of monocarpic plant *Linum usitatissimum* irradiated with different doses of ionizing radiation are presented.*

С. В. Межжерин, А. А. Циба, Д. С. Межжерина, П. П. Пухтаевич

## Ситуация нарастающего пресса генетических аномалий в диплоидно-полиплоидной популяции щиповок (*Cypriniformes, Cobitidae, Cobitis*)

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины И. А. Акимовым)

Генетический мониторинг диплоидно-полиплоидной популяции щиповок (*Cobitis taenia s. lato*) р. Ирпень (приток Днепра) показал необычайно резкие изменения ее биотипического состава за период 2001–2013 гг. Вследствие чего в этой популяции стали абсолютно доминировать особи *C. 2 elongatoides – tanaitica* с аномальными аллозимными спектрами. При этом у особей популяции стало наблюдаться резкое увеличение числа двуядерных эритроцитов. Все эти негативные генетические процессы произошли на фоне уменьшающейся численности вида в р. Ирпень, что косвенно свидетельствует о некотором снижении приспособленности особей этой популяции.

Актуальным направлением генетических исследований является анализ разнообразных нарушений работы генетического аппарата, возникающих у особей в природных популяциях. Причиной ненормального функционирования генома в естественной среде обитания может быть средовой стресс, инвазии мобильных генетических элементов и гибридизация в различных ее формах. Генетическая нестабильность проявляется как на уровне отдельных генов, так и генома в целом. В первом случае это модификации действия гена, приводящие к нарушению синтеза полипептидных цепей, во втором — геномные мутации.

В этой связи интерес вызывает случай массовых аномалий аллозимных спектров, обнаруженный у гиногенетических гибридных форм щиповок, небольших выюновых рыб, в популяции р. Ирпень (Киевская обл.) [1]. Суть феномена заключается в том, что с определенного поколения у всех самок-аллотриплоидов, имеющих два генома дунайской (*Cobitis elongatoides*) и один геном обыкновенной (*C. taenia*) щиповки, произошло уменьшение электрофоретической подвижности продукта аллеля *Aat-1*<sup>100</sup> (рис. 1). Это обстоятельство указывает на нарушение функционирования генных систем у гибридов, вызванное очевидным внедрением чужеродных генетических элементов [2–4] при псевдогамном воспроизводстве, когда самцы *C. taenia* являются донором сперматозоидов для гиногенетических триплоидных самок. Также отмечено появление беккроссов, включающих два генома обыкновенной

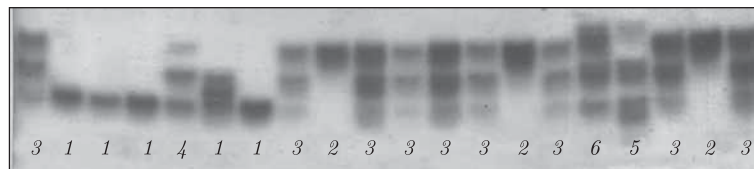


Рис. 1. Аллозимные спектры локуса *Aat-1* у щиповок различных биотипов: 1 — *C. elongatoides* (ЕЕ); 2 — *C. taenia* (ТТ); 3 — *C. elongatoides* — 2 *taenia* (ЕТТ); 4 — *C. 2 elongatoides* — *taenia* (ЕЕТ); 5 — *C. 2 elongatoides* — *taenia* (ЕТТ<sup>95</sup>); 6 — *C. 2 elongatoides* — *tanaitica* — *taenia* (ЕЕТТ<sup>95</sup>)

© С. В. Межжерин, А. А. Циба, Д. С. Межжерина, П. П. Пухтаевич, 2014

и два генома дунайской щиповок (биотип *C. 2 elongatoides* — 2 *taenia*). Это указывает на то, что наряду с псевдогамией при скрещиваниях триплоидных самок биотипа *Cobitis 2 elongatoides* — *taenia* с диплоидными самцами *Cobitis taenia* происходит инкорпорация целого хромосомного набора. При этом, несмотря на свою генетическую “патологичность”, щиповки указанных биотипов не оказались чем-то исключительным, а сразу же стали в популяции р. Ирпень численно доминировать. С момента возникновения аномальной ситуации прошло уже более 10 лет, поэтому целесообразно отследить дальнейшую динамику генетической структуры этой необычной популяции. Кроме того, возникает вопрос: связана ли ненормальная экспрессия генов с функционированием генетического аппарата в целом. В этой связи актуальным было бы использование микроядерного теста, в данном случае анализа морфологических изменений ядер эритроцитов периферической крови [5–7].

Идентификация биотипов проведена по аллозимным маркерам, степень пloidности — цитометрическим анализом, а нарушения структуры генома — по аномалиям ядер эритроцитов на мазках периферической крови.

В пределах бассейна р. Ирпень за 12-летний период исследований выявлен ряд биотипов, большей частью гибридных, геномная структура которых подробно описана ранее [8]. Это диплоидные особи щиповки обыкновенной *C. taenia* (биотип ТТ), триплоидные биотипы (*C. elongatoides* — *taenia* — *tanaitica* и *C. elongatoides* — 2 *taenia*), а также единичные в бассейне гомологичные тетраплоидные биотипы (*C. elongatoides* — 3 *taenia* и *C. elongatoides* — 2 *taenia* — *tanaitica*), которые в данном случае рассматриваются вместе как биотип (*C. elongatoides* — 2 *taenia* s. lato) в широком смысле (ЕТТ). Особи этого биотипа самые многочисленные в водотоках Среднего Днестра и часто составляют большинство особей популяции. Триплоидный биотип *C. 2 elongatoides* — *tanaitica* (ЕЕТ) обычен в бассейне Дуная, однако крайне редок в Среднеднепровском бассейне, исключение составляет р. Ирпень. Этот же триплоидный биотип, но с измененной электрофоретической подвижностью продукта аллеля *Aat-1*<sup>100</sup> (см. рис. 1), свойственного особям *C. taenia* и *C. tanaitica*, обозначен как ЕЕТ<sup>95</sup>. Тетраплоидные биотипы *C. 2 elongatoides* — *taenia* — *tanaitica* встречаются трех типов: с немодифицированным (ЕЕТТ) и модифицированным (ЕЕТТ<sup>95</sup> и ЕЕТ<sup>95</sup>Т<sup>95</sup>) спектрами *Aat-1*. Их появление — результат беккроссирования самцов *C. taenia* с соответствующими аллотриплоидами.

Распределение особей разных биотипов в выборках за период с 2001 по 2013 г. выглядит следующим образом (табл. 1). При этом наблюдается четкая тенденция увеличения особей с аномальными спектрами *Aat-1*, т. е. особей биотипа ЕЕТ<sup>95</sup> (рис. 2). В 2001 г. они не отмечены вообще, в 2002 г. — это единичные случаи, с 2004 г. — абсолютно все особи биотипа *C. 2 elongatoides* — *tanaitica* уже имели продукт гена *Aat-1*<sup>100</sup> с уменьшенной электрофоретической подвижностью. Причем в 2004–2005 гг. они составили в выборках абсолютное большинство 70,4 ± 3,93%. Дальше их представленность еще больше увеличилась (в 2006 г. — 90 ± 6,7%, в 2008 г. — 90,9 ± 8,7%, в 2013 г. — 92,6 ± 5,0%). Начиная с 2006 г., по всему бассейну реки стали попадаться тетраплоиды-беккроссы ЕЕТТ<sup>95</sup> с аномальными спектрами, частота которых колебалась от 4 до 22,3%.

Что же произошло: экспансия генетически аномальных особей, приведшая к подъему численности щиповок в бассейне Ирпеня, или просто увеличение их представленности в популяции при стабильной или падающей общей численности? На основании данных частоты попадания щиповок в орудия лова, можно утверждать, что общая численность щиповок в р. Ирпень за последние 10 лет однозначно не возрастает, а, скорее, падает. Поэтому речь,

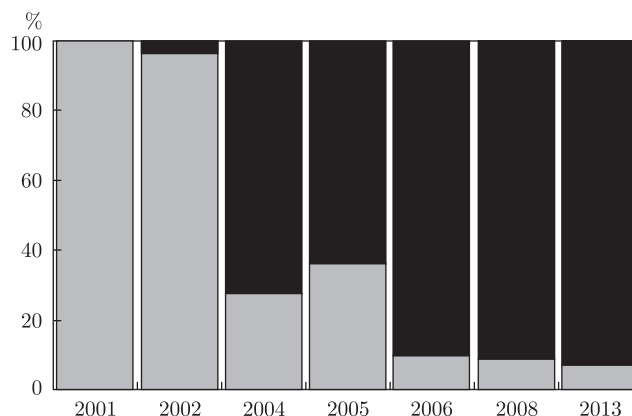


Рис. 2. Изменение соотношения между особями биотипов с нормальными спектрами *Aat-1* — ТТ ЕТТ, ЕЕТ, ЕЕТТ (светло-серое заполнение) и с аномальными спектрами ЕЕТ<sup>95</sup>, ЕЕТТ<sup>95</sup>, ЕЕТ<sup>95</sup>Т<sup>95</sup> (темно-серое заполнение) в выборках, взятых в районе г. Ирпень по годам

вероятнее всего, может идти только о большей представленности особей-носителей аномальных спектров, на фоне общего снижения численности.

Причиной такой парадоксальной тенденции могут быть как экологические факторы — изменения условий в реке, так и генетические — нарастающее число аномальных особей. В какой-то степени ответ на этот вопрос может быть получен с помощью микроядерного теста. Анализ морфологии ядер эритроцитов показал, что действительно у полиплоидных щиповок достаточно часто попадаются клетки либо с четко выраженной перетяжкой ядра, либо вообще имеющие два ядра (рис. 3). Их максимальная частота достигает 10% на тысячу просмотренных клеток. Анализ изменений средней частоты встречаемости двухъядерных эритроцитов у щиповок р. Ирпень за последние 10 лет свидетельствует о ее четком возрастании (рис. 4). Причем увеличение происходит не за счет нарастания числа двухъядерных эритроцитов отдельных особей, а вследствие увеличения числа особей, у которых эти аномалии наблюдаются. Таким образом, полученные результаты указывают на растущие нарушения генетического аппарата у полиплоидных щиповок в бассейне р. Ирпень на фоне угасания популяции.

Таблица 1. Распределение биотипов щиповок в р. Ирпень за период исследований

Населенный пункт	Год	ТТ	ЕТТ	ЕЕТ	ЕЕТ <sup>95</sup>	ЕЕТТ	ЕЕТ <sup>95</sup> Т <sup>95</sup>	ЕЕТТ <sup>95</sup>
г. Ирпень	2001	4	4	4	—	—	—	—
г. Ирпень	2002	6	19	3	1	—	—	—
г. Ирпень	2004	9	20	—	79	1	2	—
г. Ирпень	2005	2	9	—	19	—	—	—
с. Княжичи	2005	6	10	—	6	—	—	—
пгт Гостомель	2005	1	3	—	10	—	—	—
с. Демидов	2006	5	13	—	2	—	—	2
г. Ирпень	2006	1	1	—	16	—	—	2
г. Ирпень	2007	—	—	—	—	—	—	—
г. Ирпень	2008	—	1	—	8	—	—	2
г. Ирпень	2009	—	—	—	—	—	—	—
с. Стоянка	2011	1	1	—	8	—	—	3
пгт Гостомель	2011	1	1	—	1	—	—	—
г. Ирпень	2013	2	—	—	24	—	—	1



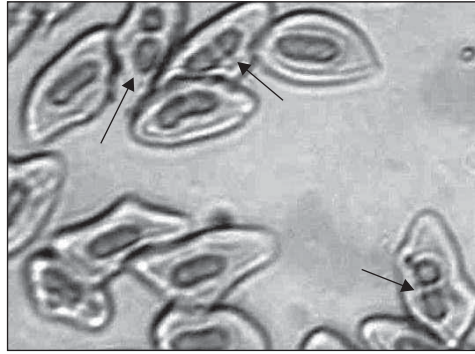


Рис. 3. Нормальные и аномальные двухъядерные эритроциты на мазках периферической крови у триплоидных щиповок биотипа *C. 2 elongatoides — tanaitica*

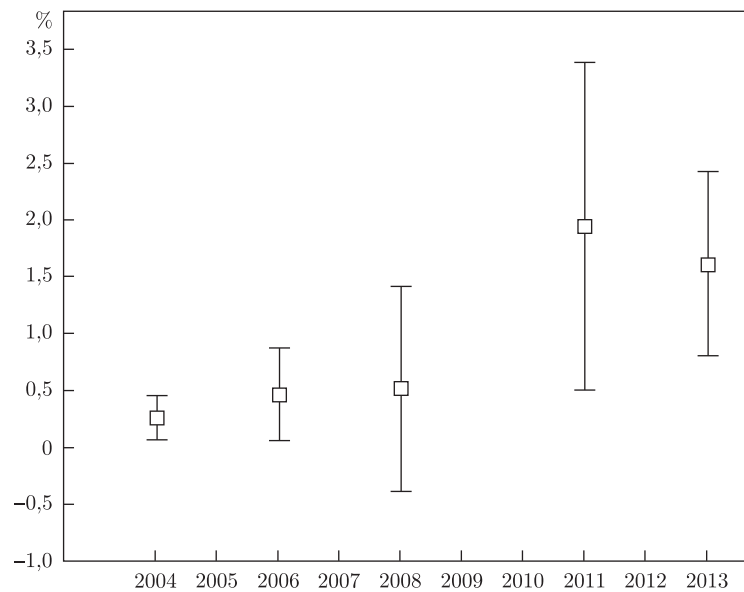


Рис. 4. Стандартное отклонение и средний процент (%) двухъядерных эритроцитов на особь в популяции щиповок р. Ирпень по годам

Как уже указывалось, в Среднем Днепре особи биотипа *C. 2 elongatoides — tanaitica* среди полиплоидных щиповок — большая редкость, тогда как в Дунае они самые обычные. Очевидно они в отличие от биотипов *C. elongatoides — 2 taenia* и *C. 2 elongatoides — tanaitica — taenia* ограничены в своем продвижении на восток. Причина в том, что в Среднем Днепре диплоидные формы щиповок представлены только *C. taenia*, а потому гиногенетические скрещивания ♀ *C. 2 elongatoides — tanaitica* могут быть только с самцами другого вида — *C. taenia*. Из-за того, что при гиногенезе происходит инкорпорация какой-то части генетического материала самца [3–5], в случае внедрения чужеродного генетического материала неизбежны негативные генетические последствия, что и происходит при указанных выше скрещиваниях. Если это так, то почему в бассейне Среднего Днепра, пусть даже и очень редко, попадаются особи *C. 2 elongatoides — tanaitica* с нормальными спектрами. Более того, специальные исследования популяций щиповок Житомирского Полесья показали, что в каналах и небольших речушках Барановского и Новоград-Волынского районов, отно-



сящих к бассейну р. Случь, практически полностью представлены особи биотипа ЕЕТ, причем с нормальными спектрами Аат. При этом в самой р. Случь в районе Новоград-Волинского, как и в большинстве рек средне- и верхнеднепровского бассейнов, доминируют особи биотипа ЕТТ. Соотношение биотипов в этой реке выглядит следующим образом: 8 ТТ, 30 ЕТТ и 3 ЕЕТ. Можно предположить, что для того, чтобы инкорпорация чужеродного материала привела к негативным последствиям, необходимо, чтобы сработал пусковой механизм, таковым может быть средовой стресс, например загрязнение воды. Последнее обстоятельство для р. Ирпень более чем актуально.

1. Межжерин С. В., Павленко Л. И. Случай гибридизации у щиповок (Osteichthyes: Cobitidae: *Cobitis*), обусловивший генетическую нестабильность и экспансию // Цитология и генетика. – 2007. – 41. – № 4. – С. 26–35.
2. Yi M. S., Li Y. Q., Liu J. D. et al. Molecular cytogenetic detection of paternal chromosome fragments in allogynogenetic gibel carp, *Carassius auratus gibelio* Bloch // Chromosome Res. – 2003. – 11, No 7. – P. 665–671.
3. Fan Z., Liu G. The ploidy and reproductive mechanism of crucian carp, *Carassius auratus gibelio* // J. Fish Biol. – 1990. – 36, Is. 3. – P. 415–419.
4. Tóth B., Várakoni E., Hidas A. et al. Genetic analysis of offspring from intra – and interspecific crosses of *Carassius auratus gibelio* by chromosome and RAPD analysis // J. Fish Biol. – 2005. – 66, No 3. – P. 784–797.
5. De Flora S., Vigario L., D'Agostini F. et al. Multiple biomarkers in fish exposed *in situ* to polluted river water // Mutat. Res. – 1993. – Is. 319. – P. 167–177.
6. Kligerman D. Fishes as biological detectors of the effects of genotoxic agents // Mutagenicity: New Horizons in Genetic Toxicology / Ed. J. Heddle. – New York: Academic Press, 1982. – P. 435–456.
7. Ueda T., Hayashi M., Ohtsuka Y. et al. A preliminary study of the micronucleus test by acridine orange fluorescent staining compared with chromosomal aberration test using fish erythropoietic and embryonic cells // Water Science Technology. – 1992. – 25. – P. 235–240.
8. Межжерин С. В., Павленко Л. И. Генетическое разнообразие, происхождение и закономерности распространения полиплоидных щиповок (Cypriniformes, Cobitidae, *Cobitis*) в пределах Украины // Цитология и генетика. – 2010. – 44, № 5. – P. 65–77.

Институт зоології ім. І. І. Шмальгаузена  
НАН України, Київ

Поступило в редакцію 20.12.2013

С. В. Межжерін, А. А. Циба, Д. С. Межжеріна, П. П. Пухтаєвич

### Ситуація зростаючого пресу генетичних аномалій в диплоїдно-поліплоїдних популяціях щиповок (*Cypriniformes*, *Cobitidae*, *Cobitis*)

Генетичний моніторинг диплоїдно-поліплоїдної популяції щиповок (*Cobitis taenia* s. lato) р. Ирпень (притока Дніпра) показав надзвичайно різкі зміни її біотипового складу за період 2001–2013 рр. Внаслідок чого в цій популяції стали абсолютно домінувати особини *C. 2 elongatoides* – *tanaitica* з аномальними алозимними спектрами. При цьому в особин популяції також спостерігається різке збільшення числа двоядерних еритроцитів. Усі ці негативні генетичні процеси відбулися на тлі падіння чисельності виду в р. Ирпень, що побічно свідчить про деяке зниження пристосованості особин цієї популяції.

S. V. Mezhzherin, A. A. Tsyba, D. S. Mezhzherina, P. P. Pukhtaevitch

**Situation of the increasing pressure of genetic abnormalities in a diploid-polyploid of population spined loaches (Cypriniformes, Cobitidae, *Cobitis*)**

*Genetic monitoring of a diploid-polyploid population of spined loach (*Cobitis taenia* s. lato) in the Irpen river (tributary of the Dnieper) has pointed unusually abrupt changes of its biotype structure for the period 2001–2013. The result is that, in this population, individuals of *C. 2 elongatoides-tanaitica* biotype with abnormal allozyme spectrum became to completely dominate. At the same time, individuals of this population also demonstrate a sharp increase in the number of binuclear erythrocytes. All these negative genetic processes occurred against the background of a declining population of the species in this river, which indirectly indicates a slight decrease in the fitness of individuals of this population.*



УДК 546.26.043

С. В. Прилуцька

## Дія комплексу $C_{60}$ фулерену і доксорубіцину на пухлинні клітини *in vitro* та *in vivo*

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Р. С. Стойкою)

*Запропоновано технологічну схему для отримання стабільного водного розчину  $C_{60}$  фулерену з антибіотиком антрациклінового ряду доксорубіцином (Докс). Встановлено антинеопластичний ефект створеного комплексу  $C_{60}$ +Докс *in vitro* на клітини асцитної карциноми Ерліха, лейкозу L1210 та карциноми легені Льюїса, а також його протипухлинну дію на ріст карциноми легені Льюїса *in vivo*. Дані результати свідчать про потенційно високу ефективність застосування комплексу  $C_{60}$ +Докс в хіміотерапії злоякісних новоутворень.*

Однією з актуальних проблем розвитку сучасної біотехнології є вирішення комплексного завдання, що лежить на стику таких наук, як хімія, фізика, матеріалознавство, біологія, медицина, та передбачає цілеспрямований дизайн, синтез і вивчення функціональних властивостей наноматеріалів (розміром до 100 нм принаймні в одному з вимірів). Останнім притаманна висока біодоступність, низька токсичність та висока специфічна біоактивність. Відзначимо, що в найближчому майбутньому за допомогою запропонованих унікальних нанобіотехнологій буде розв'язана проблема ранньої діагностики злоякісних пухлин із визначенням їх локалізації і адресної доставки лікарських препаратів до органів-мішеней. Серед можливих перспективних і ефективних біомедичних лікарських засобів значне місце займає  $C_{60}$  фулерен.

$C_{60}$  фулерен — це молекула майже сферичної форми діаметром 0,72 нм, поверхня якої складається з 60 атомів вуглецю, поєднаних між собою одинарними і подвійними хімічними зв'язками. Її можна синтезувати доступними хімічними методами, вона характеризується високою хімічною стабільністю та унікальними фотофізичними властивостями [1]. Завдяки нанорозміру, поєднанню міцності з малою масою, анти/прооксидантним властивостям [2, 3], біодоступності [4], здатності проникати всередину клітин [5, 6], немодифіковані  $C_{60}$  фулерени розглядають як фармацевтично цінні сполуки нового класу [7, 8]. Однак відзначимо, що поряд зі значними перспективами у використанні цих речовин у профілактиці та лікуванні захворювань, на цьому шляху існують також певні проблеми і перестороги. Так, дані біологічних досліджень водних дисперсій молекул  $C_{60}$  вказують на їх можливий токсичний вплив на організм людини. З іншого боку, наводяться докази, що немодифіковані  $C_{60}$  фулерени

© С. В. Прилуцька, 2014

при низьких концентраціях не є токсичними або принаймні не виявляють гострої токсичної дії у системах *in vitro* та *in vivo* [9, 10]. Встановлено, що токсичність молекул  $C_{60}$  істотно залежить від модифікації їхньої поверхні, умов синтезу і обробки, концентрації наночастинок у середовищі розчинника і відповідно розміру утворених з них агрегатів (кластерів). Припускають, що головними механізмами цитотоксичної дії  $C_{60}$  фулеренів є викликане ними перекисне окиснення ліпідів (ПОЛ), розвиток на цьому тлі оксидативного стресу та пов'язані з цим наслідки, зокрема ушкодження ДНК і некроз [11].

Одним із найпоширеніших терапевтичних засобів у хіміотерапії раку є антибіотик антрациклінового ряду — доксорубіцин (Докс) [12]. Однак його головними недоліками є кардіотоксичність і невисока специфічність, що істотно знижує ефективність лікувальної дії. Тому для покращення ефективності терапевтичної дії Докс необхідно розвивати альтернативні методи лікування злоякісних пухлин, включаючи цілеспрямований пошук нових субстанцій (зокрема, таргетних носіїв і агентів, які сприятимуть зниженню побічних ефектів). Можна припустити, що іммобілізація Докс на  $C_{60}$  фулерені [13] запобігатиме його токсичній дії на інтактні клітини і посилюватиме його проникнення в клітини-мішені.

Метою роботи було оцінити токсичний ефект комплексу  $C_{60}$  фулерену з доксорубіцином ( $C_{60}$ +Докс) *in vitro* на різні типи трансформованих клітин (асцитна карцинома Ерліха, лейкоз L1210 та карцинома легені Льюїса), а також протипухлинний ефект вказаного комплексу на ріст пухлин у експериментальних тварин із трансплантованою карциномою легені Льюїса; порівняти отримані результати з дією  $C_{60}$  фулерену окремо за умов *in vitro* та *in vivo*.

**Матеріали та методи дослідження.** Для приготування водного колоїдного розчину немодифікованих  $C_{60}$  фулеренів використовували розчин  $C_{60}$  фулерену в толуолі (чистота >99,5%), де його концентрація відповідала максимальній розчинності  $\sim 2,9$  мг/мл, та однаковий об'єм дистильованої води. Утворені фази піддавали дії ультразвуку. Процедура продовжували до повного випаровування толуолу і набуття водною фазою жовтого забарвлення. За допомогою фільтрації водного розчину відділяли розчинний продукт від нерозчинених молекул  $C_{60}$ . Цей метод дозволяє отримати різні його концентрації у воді — від 0,01 до 1,2 мг/мл. Вимірювали спектри поглинання  $C_{60}$  фулерену у воді в діапазоні довжин хвиль від 200 до 700 нм при кімнатній температурі. Як виявилось, в УФ-ділянці спектра домінують дві інтенсивні широкі смуги поглинання з максимумами при 265 й 345 нм [4]. Водний колоїдний розчин цієї сполуки при концентрації 0,15 мг/мл і температурі 4 °C є стабільним протягом 12 міс. Отримані електронно-мікроскопічні зображення і дані малокутового розсіяння нейтронів чітко вказують на присутність у воді як окремих молекул  $C_{60}$ , так і їх агрегатів з характерним розміром до 80 нм (дані не представлені).

В експериментах використовували Докс ("Pfizer", Italy; ліофілізований порошок 10 мг), розчинений у фізіологічному розчині (0,9% NaCl) при вихідній концентрації 0,15 мг/мл. Іммобілізацію Докс на  $C_{60}$  фулерені проводили за методикою: вихідний водний розчин  $C_{60}$  фулерену і Докс змішували в об'ємному співвідношенні 1 : 2. Отриману суміш обробляли ультразвуковим диспергатором упродовж 20 хв, після чого перемішували ще 12 год магнітною мішалкою при кімнатній температурі. Вимірювали спектри поглинання нативного Докс і суміші  $C_{60}$ +Докс у діапазоні довжин хвиль від 400 до 600 нм при кімнатній температурі. Виразений гіпохромний ефект, що спостерігався в експерименті, свідчить про формування стабільного комплексу між Докс і  $C_{60}$  фулереном [13].

*Досліди in vitro.* Для оцінки цитотоксичного ефекту комплексу  $C_{60}$ +Докс і  $C_{60}$  фулерену (для порівняння) були використані клітини асцитної карциноми Ерліха, лейкозу L1210 і кар-

циноми легені Льюїса, що отримані з банку клітинних ліній Інституту експериментальної патології, онкології і радіобіології ім. Р. Є. Кавецького НАН України (м. Київ). 10 мкл водного колоїдного розчину  $C_{60}$  фулерену або суміші  $C_{60}$  + Докс додавали до 100 мкл суспензії клітин у кількості  $\sim 3 \cdot 10^5$  та інкубували впродовж 18 год. Токсичний ефект досліджуваних препаратів вивчали з використанням МТТ-тесту [14], заснованого на здатності мітохондріальних дегідрогеназ дихального ланцюга перетворювати 3-(4,5-диметилтіазол-2-іл)-2,5-дифеніл-2Н-тетразолій бромід (МТТ) на формазан, який кристалізується в клітині. Суспензію клітин, що містила цей препарат, інкубували в присутності МТТ упродовж 3,5 год при 37 °С. Осад формазану розчиняли в концентрованому розчині DMSO. Вимірювання екстинкції проводили на цифровому спектрофотометрі ( $\mu$ Quant, БіоТЕК, США) на довжині хвилі 540 нм. Цитотоксичну активність досліджуваного препарату розраховували за формулою:  $(1 - \varepsilon/\varepsilon_0) \cdot 100\%$ , де  $\varepsilon_0$  і  $\varepsilon$  — екстинкція контрольної та дослідної проби відповідно.

*Дослиди in vivo.* Самці мишей лінії С57В/6 (вага 20–25 г) перебували на стандартній дієті віварію (Інститут експериментальної патології, онкології і радіобіології ім. Р. Є. Кавецького НАН України, Київ) при температурі  $(25 \pm 1)$  °С. Усі експерименти проводили відповідно до нормативів Європейської конвенції про захист хребетних тварин під контролем біоетичної комісії вказаної установи.

Карцинома легені Льюїса була трансплантована внутрішньом'язово в кінцівку мишей ( $5 \cdot 10^5$  пухлинних клітин у 0,2 мл фізіологічного розчину). Як відомо, цей тип пухлини характеризується високим ступенем метастазування в легеню [8]. Тварини розподіляли на три групи: перша — миші з перещепленою пухлиною, яким на наступну добу після цього внутрішньочеревно вводили 0,9% NaCl в об'ємі 0,2 мл п'ять разів через день (контроль,  $n = 7$ ); друга — миші, яким на наступну добу після перещеплення пухлини внутрішньочеревно вводили водний колоїдний розчин  $C_{60}$  фулерену в об'ємі 0,2 мл п'ять разів через день ( $n = 7$ ) [8]; третя — миші, яким на наступну добу після перещеплення пухлини внутрішньочеревно вводили суміш  $C_{60}$ +Докс в об'ємі 0,2 мл п'ять разів через день ( $n = 7$ ). Кінцеві дози  $C_{60}$  фулерену та комплексу  $C_{60}$ +Докс становили 7,5 мг/кг. Характер введення препаратів, що містили  $C_{60}$  фулерен, обрано з урахуванням того факту, що молекули  $C_{60}$ , які вводили внутрішньочеревно щурам (доза — 500 мг/кг), виводилися з організму впродовж 2–4 діб [15]. Варто також зазначити, що використана доза  $C_{60}$  фулерену в експериментах була значно нижчою за значення ЛД<sub>50</sub>, що при пероральному введенні мишам становила 600 мг/кг ваги тіла [15].

Кінетику росту карциноми легені Льюїса у мишей досліджували шляхом вимірювання її поперечних розмірів ( $a$  й  $b$  — довжина й ширина (в мм) відповідно) та розрахунку об'єму пухлини за формулою:  $V = 1/2((a + b)/2)^3$  [8]. Вимірювання розпочинали на 10-у добу після перещеплення пухлини, коли її спостерігали візуально, і закінчували на 21-у добу експерименту після загибелі першої тварини у контрольній групі.

Статистичний аналіз вірогідності експериментальних даних проводили за допомогою  $t$ -критерію Стьюдента (рівень значущості  $p \leq 0,05$ ) з попередньою перевіркою гіпотези про нормальний закон розподілу випадкової величини за критерієм Колмогорова–Смірнова.

**Результати та їх обговорення.** Отриманими результатами з вивчення цитотоксичної активності (за допомогою МТТ-тесту) досліджуваних препаратів щодо пухлинних клітин різного типу доведено, що  $C_{60}$  фулерен (0,15 мг/мл) проявляє максимальний токсичний ефект на клітини асцитної карциноми Ерліха ( $\sim 26\%$ ), взагалі не виявляє такої дії щодо клітин лейкозу L1210 і, навпаки, на  $\sim 17\%$  стимулює ріст клітин карциноми легені Льюїса (*вибірковість цитотоксичної дії  $C_{60}$  фулерену*). Можливо, це зумовлено посиленням

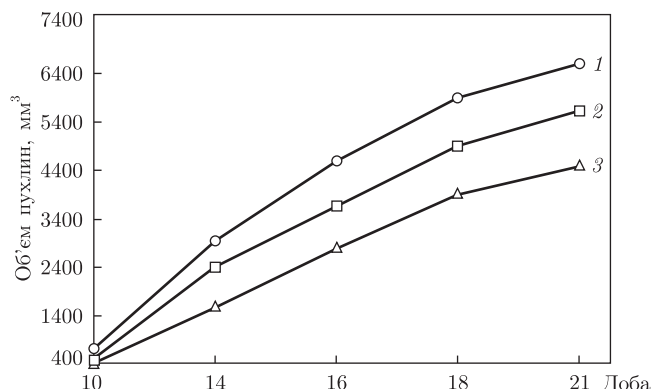


Рис. 1. Динаміка росту карциноми легені Льюїса у мишей трьох груп: 1 — контроль; 2 — за умов введення  $C_{60}$  фулерену; 3 — за умов введення комплексу  $C_{60}$  + Докс.  $p \leq 0,05$  відносно контролю. Номери кривих відповідають номерам груп

метаболізму, що зумовлює зростання проліферативної активності клітин карциноми легені Льюїса.

Застосування комплексу  $C_{60}$ +Докс порівняно з дією  $C_{60}$  фулерену характеризувалося значним зростанням токсичного впливу на всі типи пухлинних клітин *in vitro*: на  $\sim 78\%$  щодо клітин асцитної карциноми Ерліха,  $\sim 60\%$  щодо клітин лейкозу L1210 і  $\sim 91\%$  щодо клітин карциноми легені Льюїса.

Кінетика росту карциноми легені Льюїса *in vivo* впродовж тривалості експерименту (з 10 до 21-ї доби) має нелінійний характер (рис. 1). Отримані дані свідчать, що у другій групі (введення  $C_{60}$  фулерену) гальмування росту (об'єму) пухлини на 16 і 21-у добу експерименту становило 18 і 17% відповідно у порівнянні з контрольною групою, у той час як у третій групі (введення комплексу  $C_{60}$ +Докс) — 37 й 33% відповідно. Отже, протипухлинна дія вказаного комплексу майже вдвічі перевищила протипухлинну дію  $C_{60}$  фулерену.

Таким чином, створено стабільний комплекс  $C_{60}$ +Докс, який можна розглядати як *новий фармакологічний препарат*. Як за умов *in vitro*, так і *in vivo* використання комплексу  $C_{60}$ +Докс призводить до підвищеного токсичного впливу на пухлинні клітини порівняно з використанням вільного  $C_{60}$  фулерену.

Можна припустити, що завдяки унікальній системі спряжених подвійних зв'язків на поверхні  $C_{60}$  фулерену він здатен нейтралізувати активні форми кисню (АФК), приєднуючи неспарений електрон і перетворюючись на стабільний радикал  $C_{60}^{\cdot-}$ . Це дозволяє запобігати цитотоксичним ефектам АФК, які продукуються в інтактних клітинах у випадку використання традиційного протипухлинного препарату Докс (*антиоксидантна активність*  $C_{60}$  фулерену). Крім цього,  $C_{60}$  фулерен може слугувати засобом доставки протипухлинного чинника, зокрема Докс, до клітин злоякісних пухлин ( *$C_{60}$  фулерен як носій лікарських препаратів*).

1. Матисhevська О. П., Прилуцька С. В., Гринюк І. І. Фулерени  $C_{60}$  — біологічно активні молекули. I. Фізико-хімічні властивості та біодоступність // Біотехнологія. — 2010. — **3**, № 1. — С. 18–26.
2. Burlaka A. P., Sidorik E. P., Prylutska S. V. et al. Catalytic system of the reactive oxygen species on the  $C_{60}$  fullerene basis // Exp. Oncol. — 2004. — **26**. — P. 326–327.
3. Prylutska S. V., Grynyuk I. I., Matyshevska O. P. et al. Anti-oxidant properties of  $C_{60}$  fullerenes *in vitro* // Fullerenes Nanotubes Carbon Nanostruct. — 2008. — **16**. — P. 698–705.
4. Scharff P., Risch K., Carta-Abelmann L. et al. Structure of  $C_{60}$  fullerene in water: spectroscopic data // Carbon. — 2004. — **42**. — P. 1203–1206.



5. Prylutska S. V., Matyshevska O. P., Grynyuk I. I. et al. Biological effects of C<sub>60</sub> fullerenes *in vitro* and in a model system // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2007. – **468**. – P. 265–274.
6. Prylutska S., Bilyy R., Overchuk M. et al. Water-soluble pristine fullerenes C<sub>60</sub> increase the specific conductivity and capacity of lipid model membrane and form the channels in cellular plasma membrane // J. Biomed. Nanotechnol. – 2012. – **8**. – P. 522–527.
7. Medicinal Chemistry and Pharmacological Potential of Fullerenes and Carbon Nanotubes. – Ser. Carbon Materials: Chemistry and Physics / Ed. F. Cataldo, T. Da Ros. – Berlin: Springer, 2008. – Vol. 1.
8. Prylutska S. V., Burlaka A. P., Prylutsky Yu. I. et al. Pristine C<sub>60</sub> fullerenes inhibit the rate of tumor growth and metastasis // Exp. Oncol. – 2011. – **33**. – P. 162–164.
9. Andrievsky G., Klochkov V., Derevyanchenko L. Is the C<sub>60</sub> Fullerene Molecule Toxic?! // Fullerenes Nanotubes Carbon Nanostruct. – 2005. – **13**. – P. 363–376.
10. Prylutska S. V., Grynyuk I. I., Grebinyk S. M. et al. Comparative study of biological action of fullerenes C<sub>60</sub> and carbon nanotubes in thymus cells // Mat.-wiss. u. Werkstofftech. – 2009. – **40**. – P. 238–241.
11. Rouse J. G., Yang J., Barton A. R., Monteiro-Reviere N. A. Fullerene-based amino acid nanoparticle interactions with human epidermal keratinocytes // Toxicol. In Vitro. – 2006. – **20**. – P. 1313–1320.
12. Hrelia S., Fiorentini D., Maraldi T. et al. Doxorubicin induced early lipid peroxidation associated with changes in glucose transport in cultured cardiomyocytes // Biochem. Biophys. Acta. – 2002. – **64**. – P. 139–145.
13. Evstigneev M. P., Buchelnikov A. S., Voronin D. P. et al. Complexation of C<sub>60</sub> fullerene with aromatic drugs // Chem. Phys. Chem. – 2013. – **14**. – P. 568–578.
14. Carmichael J., De Graff W. G., Gazdar A. F. et al. Chemosensitivity testing of small cell lung cancer using the MTT assay // Br. J. Cancer. – 1991. – **63**. – P. 75–83.
15. Gharbi N., Pressac M., Hadchouel M. et al. C<sub>60</sub> fullerene is a powerful antioxidant *in vivo* with no acute or subacute toxicity // Nano Lett. – 2005. – **5**. – P. 2578–2585.

Київський національний  
університет ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 26.11.2013

**С. В. Прилуцкая**

### **Действие комплекса C<sub>60</sub> фуллерена и доксорубицина на опухолевые клетки *in vitro* и *in vivo***

*Предложена технологическая схема для получения стабильного водного раствора C<sub>60</sub> фуллерена с антибиотиком антрациклинового ряда доксорубицином (Докс). Установлен антинеопластичный эффект созданного комплекса C<sub>60</sub>+Докс *in vitro* на клетки асцитной карциномы Эрлиха, лейкоза L1210 и карциномы легкого Льюиса, а также его противоопухолевое действие на рост карциномы легкого Льюиса *in vivo*. Данные результаты свидетельствуют о потенциально высокой эффективности применения комплекса C<sub>60</sub>+Докс в химиотерапии злокачественных новообразований.*

**S. V. Prylutska**

### **Effect of the complex of C<sub>60</sub> fullerene with doxorubicin on tumor cells *in vitro* and *in vivo***

*A technological scheme for preparing a stable aqueous solution of C<sub>60</sub> fullerene with an antibiotic doxorubicin (Dox) of the anthracycline row is proposed. The toxic effect of the C<sub>60</sub>+Dox complex on cells of Ehrlich ascites carcinoma, leukemia L1210, and Lewis lung carcinoma is demonstrated. Its antitumor effect on Lewis lung carcinoma *in vivo* was also shown. Thus, a high efficiency of the C<sub>60</sub>+Dox complex in the anticancer therapy is postulated.*



А. В. Семеніхін, О. К. Золотарьова

## Ідентифікація карбоангідразної активності, асоційованої з білковими комплексами фотосинтетичних мембран хлоропластів шпинату

*(Представлено членом-кореспондентом НАН України Є. Л. Кордюм)*

Білкові комплекси фотосинтетичних мембран хлоропластів шпинату були розділені методом нативного електрофорезу із зміщенням заряду після солюбілізації мембран неіонним детергентом дигітоніном. Для визначення зон гелю, які містили АТФ-синтазний комплекс і його відокремлену каталітичну частину ( $CF_1$ ), була використана кольорова реакція на АТФазну активність. Цитохромному  $b_6f$  комплексу тилакоїдів відповідала зона, яка завдяки присутності цитохромів мала червоний колір у нефарбованому гелі. Локалізація цитохромного  $b_6f$  комплексу, АТФ-синтази і  $CF_1$  підтверджена аналізом субодиничного складу відповідних білкових зон після ДДС-електрофорезу. Визначення карбоангідразної активності в білкових зонах неденатурованого гелю шляхом фарбування бромтимоловим синім показало, що крім фотосистеми II, яка містить компоненти з карбоангідразною активністю, карбоангідраза асоційована також цитохромним  $b_6f$  комплексом і АТФ-синтазою. Наведені дані свідчать на користь припущення про участь множинних форм карбоангідрази у внутрішньотилакоїдному перенесенні протонів від центрів їх утворення до АТФ-синтази.

Карбоангідраза (КА, карбонат гідроліаза, ЕС 4.2.1.1) — металофермент, що містить цинк і каталізує взаємоперетворення  $CO_2$  і  $HCO_3^-$ . КА в десятки тисяч разів прискорює встановлення рівноваги між формами вугільної кислоти, яке в розчині досягається дуже повільно [1, 2]. У кристах мітохондрій, цитоплазмі (гіалоплазмі) та стромі хлоропластів вищих рослин наявні як розчинні форми ферменту, так і зв'язані з плазматичними та тилакоїдними [3] мембранами. Експериментально показано, що в тилакоїдних мембранах хлоропластів молекули КА асоційовані принаймні з трьома різними компонентами електрон-транспортного ланцюга тилакоїдов. Два носія карбоангідразної активності знайдені як в мономерах, так і в димерах фотосистеми II (ФСII). Препарати мембран, збагачених фотосистемою I (ФСІ), також містять КА [1, 3]. Доведено, що КА, асоційована з ФСII, каталізує утворення іонів бікарбонату в кількості, достатній для зв'язування протонів, що вивільняються у внутрішній об'єм тилакоїду при фотосинтетичному окисненні води [2]. Встановлено [4], що вільна дифузія не може бути ефективним механізмом перенесення протонів від центрів їх утворення всередині тилакоїду до АТФ-синтази. Транспорт протонів значно прискорюється при залученні полегшеної дифузії за участю рухливих буферів, зокрема бікарбонату, фонд якого підтримується завдяки активності КА. Це дає підставу для припущення, що, крім асоційованих з ФСІ та ФСII карбоангідраз, у складі інших мембранних поліпептидних комплексів можуть бути присутні білки з карбоангідразною активністю.

У тилакоїдних мембранах, крім хлорофілвімістних поліпептидних комплексів фотосистем, наявні також інтегральні мультибілкові комплекси цитохромів  $b_6f$  і АТФ-синтази, а також, згідно з останніми даними, НАД-дегідрогеназний комплекс [5]. Разом ці компоненти

забезпечують фотосинтетичне перенесення електронів і спряжене з ним перенесення протонів, у результаті якого формується трансмембранний протонний градієнт — рушійна сила в процесі синтезу АТФ, тобто всі основні поліпептидні комплекси фотосинтетичних мембран беруть участь у світлозалежному протонному обміні.

Мета дослідження полягала у виявленні білкових комплексів тилакоїдної мембрани, з якими асоційована карбоангідразна активність.

Для цього був відпрацьований метод нативного електрофорезу зі зміщенням заряду для розділення нативних пігмент-білкових та білкових комплексів із листя шпинату і визначена карбоангідразна активність цих поліпептидів.

Тилакоїди виділяли зі свіжого подрібненого листя шпинату, руйнуючи їх у гомогенізаторі в крижаному буфері (20 мМ трис/NaOH (рН 7,8), 400 мМ сорбітол, 2 мМ ЕДТА, 1 мМ MgCl<sub>2</sub>, 5 мМ аскорбат і 0,1% БСА, 0,05% цистеїн, 1 мМ фенілметилсульфонілфторид (ФМСФ)). Суспензію фільтрували через два шари полотна і центрифугували при 200 g 3 хв та при 2500 g протягом 10 хв. Осад ресуспендували в гіпотонічному буфері (20 мМ трис/NaOH (рН 7,5), 5 мМ сорбітол та 5 мМ MgCl<sub>2</sub>) з подальшим центрифугуванням при 2500 g протягом 4 хв та при 15000 g протягом 10 хв. Осад, який містив ізольовані тилакоїди, промивали буфером зберігання (330 мМ сорбітол, 10 мМ NaCl, 10 мМ KCl, 2,5 мМ MgCl<sub>2</sub>, 10 мМ Трис/NaOH, рН 7,8) і після переосадження суспендували в невеликому об'ємі буферу зберігання при концентрації хлорофілу 4 мг/мл (концентрація білка 20 мг/мл). Усі операції по ізоляції тилакоїдів проводили 4 °С. Концентрацію хлорофілу в препаратах тилакоїдних мембран визначали за Арноном [6], концентрацію білка — за Лоурі [7].

Для солубілізації білкових комплексів очищені тилакоїдні мембрани інкубували протягом 30 хв при 4 °С у 10% розчині дигітоніну (при співвідношеннях детергент/білок 1 : 1; 2 : 1; 4 : 1; 8 : 1) за наявності інгібіторів протеаз 0,75 М амінокапронової кислоти і 1 мМ ФМСФ. Після інкубації (60 хв, 4 °С) фракцію розчинених білків тилакоїдних мембран відокремлювали центрифугуванням протягом 45 хв при 140 000 g і 4 °С. Вміст білка в супернатанті визначали за Лоурі [7].

Нативний електрофорез зі зміщенням заряду мембранних білкових комплексів проводили в модифікованій системі за Андерсоном та ін. [8] і Колісніченком та ін. [9] у блоках ПААГ (70 × 80 × 1 мм), у градієнті концентрації акриламід (4–11%) у 0,375 М трис HCl (рН 8,8) буфері. Концентруючий (формуєчий) гель містив 3,75% акриламід у 0,0625 М трис HCl (рН 6,8) буфері. Верхній (катодний) та нижній (анодний) електродні буфери склалися з розчину гліцину і трису (25 мМ трис HCl, 192 мМ гліцин), рН 8,3. Для забезпечення зміщення заряду в катодний електродний буфер додавали 0,005% розчин додецилсульфату натрію (ДДС-Na).

Для аналізу субодиничного складу комплексів, отриманих під час нативного електрофорезу, смужку гелю з білковими треками вирізали та проводили ДДС-денатуруючий електрофорез у другому напрямку в модифікованій системі Леммлі [10] у блоках ПААГ (70 × 80 × 1 мм). Розділюючий (робочий) гель формували, створюючи градієнт концентрації акриламід від 10 до 20%. Концентруючий (формуєчий) гель містив 4% акриламід. Білкові зони візуалізували за допомогою барвника кумасі R-250. Для визначення АТФазної активності використовували методи Алена і Хінцика [11] та Гоморі [12]. Гелі після нативного електрофорезу інкубували протягом ночі в розчині 10 мМ АТФ, 10 мМ CaCl<sub>2</sub> у 100 мМ трис HCl (рН 9,5). Потім гель промивали водою та інкубували протягом 20 хв у 3 мМ розчині Pb(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, приготованому на 80 мМ трис-малатному буфері (рН 7,0). Після промивання водою гелі занурювали в 0,2% розчин Na<sub>2</sub>S. Місця локалізації АТФ-синтази проявлялися

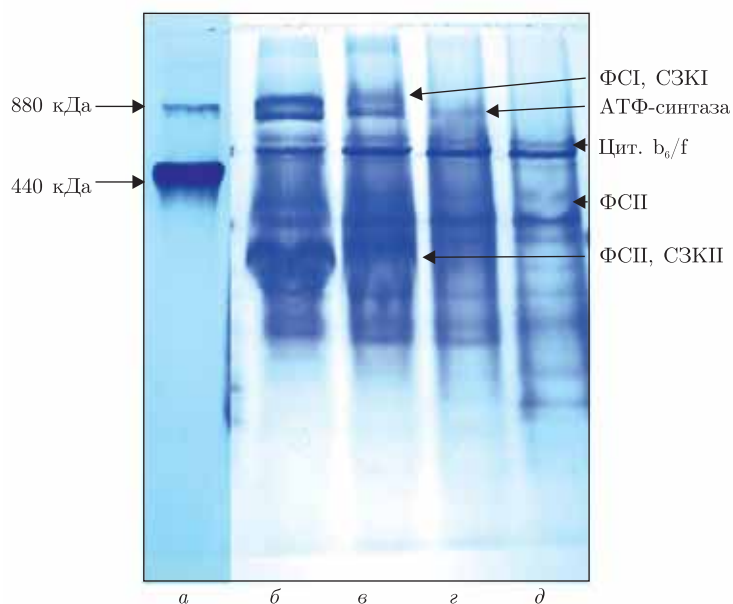


Рис. 1. Електрофоретичне розділення компонентів ізолюваних тилакоїдних мембран шпинату в ПААГ після солюбізації в 10% розчині дигітоніну в присутності 0,75 М амінокапронової кислоти і 1 мМ ФМСФ.

*a* — маркерні білки (феритин, мономер та димер); *b-d* — тилакоїди, солюбілізовані дигітоніном при співвідношенні детергент/білок: *b* — 8 : 1, *v* — 2 : 1, *z* — 4 : 1, *d* — 1 : 1

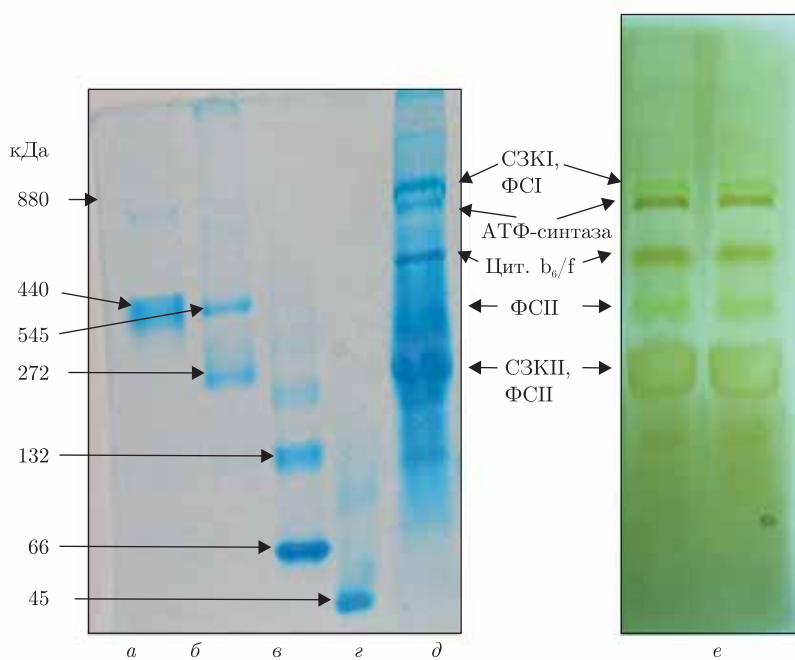


Рис. 2. АТФазна активність білкових зон нативного ПААГ електрофорезу тилакоїдів листків шпинату. Електрофореграма гелю, пофарбованого сульфідом свинцю, стрілки показують зони прояву АТФ-синтазної активності.

*a-z* — білки-маркери; *d* — білкові зони тилакоїдних мембран після солюбілізації дигітоніном; *e* — білкові зони, у яких виявилась АТФазна активність

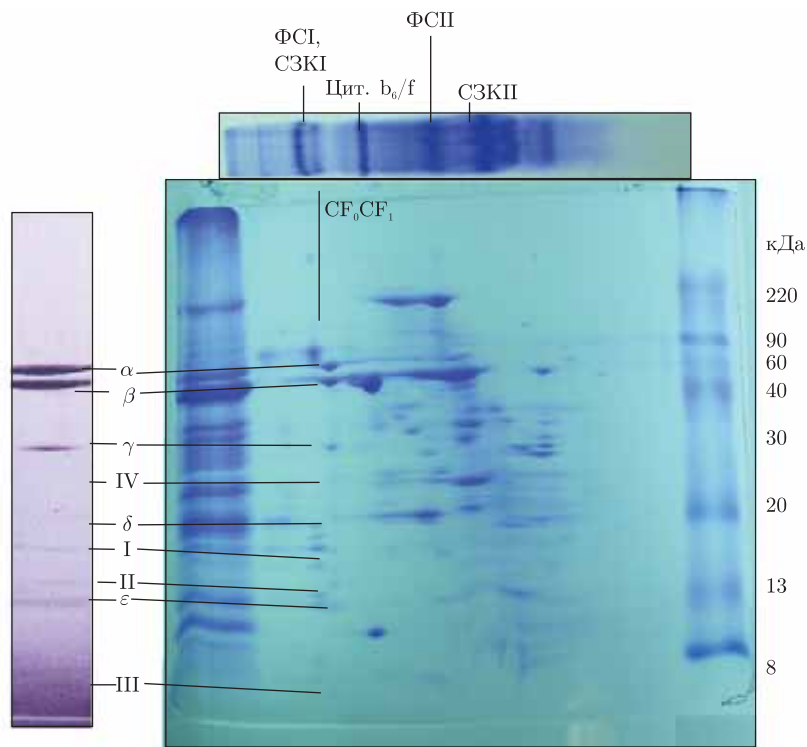


Рис. 3. Поділ білкових комплексів у другому напрямку (система Леммлі) ДДС / ПААГ і фарбування кумасі R-250. Молекулярну масу вказано в кДа. Субодиниці  $CF_0CF_1$  I (19 кДа), II (16,5 кДа), III (8 кДа), IV (25 кДа) і субодиниці  $CF_1$   $\alpha$  (60 кДа),  $\beta$  (56 кДа),  $\gamma$  (39 кДа),  $\delta$  (20,5 кДа),  $\varepsilon$  (14,7 кДа)

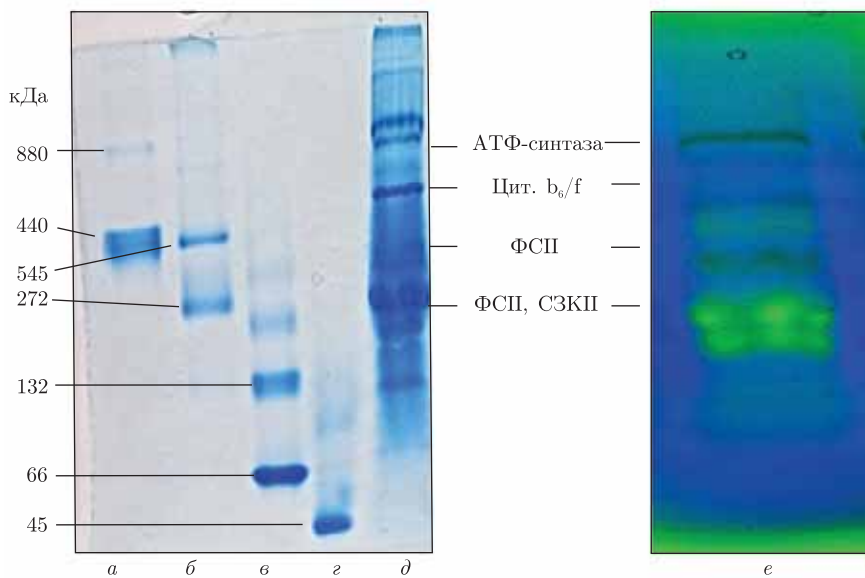


Рис. 4. Карбоангідрозна активність білкових зон нативного ПААГ електрофорезу тилакоїдів листя шинату. Електрофореграми гелю, пофарбованого бромтимоловим синім (e), стрілки показують зони прояву карбоангідрозної активності. a-g — білки-маркери; d — білкові зони тилакоїдних мембран після солюбілізації дигітоніном; e — білкові зони, у яких виявилась карбоангідрозна активність

у вигляді темно-червоних смуг за рахунок утворення нерозчинного PbS. Візуалізацію карбоангідразної активності проводили за методом Едвардса і Петтона [13]. Гелі інкубували 30 хв у 0,2% розчині бромтимолового блакитного на 50 мМ вероналовому буфері (рН 9,0), далі гель перенесли у воду, насичену CO<sub>2</sub> при 0 °С. У місці локалізації КА блакитне забарвлення індикатора змінювалося на жовте.

Залежно від природи детергенту та співвідношення детергент/білок в інкубаційному середовищі досягається солюбілізація тих чи інших пігмент-білкових комплексів. Дослідження екстрагуючої здатності різних детергентів [14] показали, що найефективніше солюбілізація білкових компонентів стромальних ділянок тилакоїдів відбувається при використанні дигітоніну. Для вирішення завдань роботи потрібно було ізолювати нативні комплекси ламелярних (стромальних) мембран.

Результати електрофоретичного розділення в ПААГ компонентів ізолюваних тилакоїдних мембран після солюбілізації дигітоніном показані на рис. 1. Видно, що кількість білкових зон на електрофореграмах залежить від співвідношення детергент/білок, причому високомолекулярні комплекси проявляються при більш високому вмісті детергенту. За даними рис. 1, найефективніша солюбілізація нативних білкових комплексів тилакоїдів досягалася при співвідношенні дигітонін/білок 8 : 1. Цей режим солюбілізації дає можливість виявити білкові структури з молекулярною масою  $\approx 900$  кДа і більше. При електрофоретичному розділенні солюбілізованих дигітоніном комплексів тилакоїдів на незабарвлених електрофореграмах у білковій зоні, яка мігрує приблизно як маркер з мол. масою 440 кДа, чітко проявляється смуга червоного кольору. Ця смуга, вірогідно, має відношення до цитохромного b<sub>6</sub>f комплексу, який через наявність залізовмісних цитохромів у нативному стані забарвлений у червоний колір.

Для виявлення серед білкових зон таких, які мають АТФазну активність і, відповідно, можуть бути частиною нативного АТФ-синтазного комплексу, ми проаналізували специфічну ферментну активність у ПААГ-гелях. Після проявлення гелів за наявності АТФ та нітрату плюмбуму були виявлені чотири білкові смуги, що мають АТФазну активність. Положення цих смуг у гелі відповідає 700–750 кДа,  $\approx 600$  кДа і  $\approx 130$ –200 кДа.

Як видно з рис. 2, АТФазна активність реєструється в білковій зоні з мол. масою 600 кДа, яка, за даними [15], відповідає повному комплексу АТФ-синтази тилакоїдів. Крім того, АТФазну активність мали білкова зона з мол. масою  $>900$  кДа, яка, вірогідно, відповідає олігомерній формі ферменту, і білкова зона з мол. масою 200 кДа, близькою до молекулярної маси фактора спряження CF<sub>1</sub>. Фактор спряження CF<sub>1</sub> є каталітичною (водорозчинною) частиною АТФ-синтазного комплексу, яка не містить гідрофобних субодиниць, що забезпечують занурення повного комплексу в мембрану. CF<sub>1</sub> зберігає здатність каталізувати реакцію гідролізу АТФ, завдяки чому легко виявляється на електрофореграмах.

Аналіз пептидного складу білкових зон, пов'язаних з АТФ-синтазою, проводили за допомогою методу електрофорезу в другому напрямку в денатуруючих умовах у присутності ДДС — Na (система Леммлі). Після розділення нативних білків та білкових комплексів (перший напрямок) смужку гелю вирізали, інкубували за наявності ДДС-Na та меркаптоетанолу й поміщали в систему денатуруючого ДДС-електрофорезу (система Леммлі). ДДС-електрофорез у другому напрямку поліпептидного комплексу показав наявність усіх субодиниць АТФ-синтазного комплексу — CF<sub>0</sub>CF<sub>1</sub>. Визначено дев'ять пептидних складових (рис. 3): субодиниці CF<sub>0</sub> I (19 кДа), II (16,5 кДа), III (8 кДа), IV (25 кДа) і субодиниці CF<sub>1</sub>  $\alpha$  (60 кДа),  $\beta$  (56 кДа),  $\gamma$  (39 кДа),  $\delta$  (20,5 кДа),  $\epsilon$  (14,7 кДа), молекулярні маси яких в основному відповідають літературним даним [15].



Електрофореграма білкових зон, які були ферментно активними в АТФазній реакції, показує (див. рис. 3), що набір поліпептидів, з яких складаються білкові зони з мол. масою  $\approx 600$  і  $\approx 900$  кДа, є дуже близьким і відповідає поліпептидному складу повного АТФ-синтазного комплексу. Білкові зони з мол. масою 900 кДа та більше виявлялися на електрофореграмі за умов використання дигітоніну при співвідношенні до білка 8 : 1. На цій підставі можна зробити висновок, що додавання дигітоніну до тилакоїдів у співвідношенні 8 : 1 призводить до повної солюбілізації основних мембранних пігмент-білково-ліпідних комплексів тилакоїдів, що зберігають свою структуру і функціональну активність.

У паралельному експерименті по локалізації КА було показано, що в цьому поліпептидному комплексі наявна і карбоангідразна активність. Найбільш активною є КА, пов'язана із ФСІІ (рис. 4), що узгоджується з даними літератури [1–3]. Крім того, карбоангідразна активність надійно виявлялася також у білкових зонах, які містили АТФ-синтазу і цитохромний  $b_6f$  комплекс. Оскільки, як зазначалося вище, у складі комплексу ФСІІ знайдено два носія карбоангідразної активності [1, 3], це, можливо, пояснює більш інтенсивне забарвлення білкової зони ФСІІ за умов нашого експерименту.

Таким чином, показано, що основні комплекси тилакоїдної мембрани (ФСІІ, цитохромний  $b_6f$  комплекс і АТФ-синтаза) асоційовані з компонентами, які мають карбоангідразну активність. Оскільки ці комплекси беруть участь у перенесенні протонів, отримані результати свідчать на користь висунутого припущення про залучення множинних форм КА тилакоїдів у процеси фотосинтетичного протонного транспорту.

1. Ignatova L. K., Rudenko N. N., Mudrik V. A. et al. Carbonic anhydrase activity in *Arabidopsis thaliana* thylakoid membrane and fragments enriched with PSI or PSII // *Photosynth. Res.* – 2011. – **110**, No 2. – P. 89–98.
2. Shutova T., Kenneweg H., Buchta J. et al. The photosystem II-associated Cah3 in *Chlamydomonas* enhances the O<sub>2</sub> evolution rate by proton removal // *EMBO J.* – 2008. – **27**, No 5. – P. 782–791.
3. Игнатова Л. К., Руденко Н. Н., Христин М. С., Иванов Б. Н. Гетерогенная природа карбоангидразной активности тилакоидных мембран // *Биохимия.* – 2006. – **71**, № 5. – С. 651–659.
4. Золотарева Е. К. Протонная регуляция процессов фотосинтетической трансформации энергии // *Физиология и биохимия культ. растений.* – 2010. – **42**, № 1. – С. 37–50.
5. Aro E.-M., Suorsa M., Rokka A. et al. Dynamics of photosystem II: a proteomic approach to thylakoid protein complexes // *J. Exp. Bot.* – 2005. – **56**. – P. 347–356.
6. Arnon D. I. Copper enzymes in isolated chloroplasts. Polyphenolase in *Beta vulgaris* // *Plant Physiol.* – 1949. – **24**, No 1. – P. 1–154.
7. Lowry O. H., Rosebrough N. J., Farr A. L., Randall R. J. Protein measurement with the Folin phenol reagent // *J. Biol. Chem.* – 1951. – **193**. – P. 265–275.
8. Anderson L., Borg H., Mikaelsson M. Molecular weight estimation of proteins by electrophoresis in polyacrylamide gels of graded porosity // *FEBS Lett.* – 1972. – **20**. – P. 199–202.
9. Колесниченко А. В., Остроумова Е. А., Зыкова В. В. и др. Белки четырех видов злаков, иммунохимически родственные стрессовому белку 310 кД // *Физиология растений.* – 2000. – **47**, № 2. – С. 199–202.
10. Laemmli U. K. Cleavage of structural proteins during the assembly of the head of bacteriophage T4 // *Nature.* – 1970. – **227**. – P. 680–685.
11. Allen J. M., Hyncik G. Localization of alkaline phosphatases in gel matrices following electrophoresis // *J. Histochem. Cytochem.* – 1963. – **11**, No 2. – P. 169–175.
12. Gomori G. Preparation of buffers for use in enzyme studies // *Meth. Enzymol.* – 1955. – **1**. – P. 138–146.
13. Edwards L. J., Patton R. L. Visualization of carbonic anhydrase activity in polyacrilamide gel // *Stain Technol.* – **41**, No 6. – P. 333–334.
14. Ärvi S. J., Suorsa M., Paakkari V., Aro E.-M. Optimized native gel systems for separation of thylakoid protein complexes: novel super – and mega-complexes // *Biochem. J.* – 2011. – **439**. – P. 207–214.

15. *McCarty R. E.* A plant biochemist's view of  $H^+$ -ATPases and ATP synthases // *J. Exp. Biol.* – 1992. – **172**. – P. 431–441.

*Институт ботаники ім. М. Г. Холодного  
НАН України, Київ*

*Надійшло до редакції 17.10.2013*

**А. В. Семенихин, Е. К. Золотарева**

### **Идентификация карбоангидразной активности, ассоциированной с белковыми комплексами фотосинтетических мембран хлоропластов шпината**

*Белковые комплексы фотосинтетических мембран хлоропластов шпината были разделены методом нативного электрофореза со смещением заряда после их солюбилизации неионным детергентом дигитонином. Для определения зон геля, содержащих АТФ-синтазный комплекс и его каталитическую часть ( $CF_1$ ), была использована цветная реакция на АТФазную активность. Цитохромному  $b_6f$  комплексу тилакоидов соответствовала зона, которая из-за наличия цитохромов имела красную окраску в неокрашенном геле. Локализация цитохромного  $b_6f$  комплекса, АТФ-синтазы и  $CF_1$  подтверждена анализом субъединичного состава соответствующих белковых зон после ДДС-электрофореза. Определение карбоангидразной активности в белковых зонах неденатурированного геля цветной реакцией с бромтимоловым синим показало, что кроме фотосистемы II, которая содержит компоненты с карбоангидразной активностью, карбоангидраза ассоциирована также с цитохромным комплексом  $b_6f$  и АТФ-синтазой. Приведенные данные свидетельствуют в пользу предположения об участии множественных форм карбоангидразы во внутритилакоидном переносе протонов от центров их образования к АТФ-синтазе.*

**A. V. Semenihih, E. K. Zolotareva**

### **Identification of carbonic anhydrase activity associated with protein complexes of photosynthetic membranes of spinach chloroplasts**

*Protein complexes of photosynthetic membranes of spinach chloroplasts were separated by native charge shift electrophoresis after the solubilization of membranes by a non-ionic detergent digitonin. To determine the areas of the gel that contained the ATP synthase complex and its isolated catalytic part ( $CF_1$ ), the color reaction for ATPase activity was used. Due to the presence of cytochromes, the  $b_6f$  thylakoid membrane complex was red in the unstained gel. The localization of cytochrome  $b_6f$  complex, ATP synthase, and  $CF_1$  was confirmed by the subunit analysis of the corresponding protein zones by SDS-electrophoresis. Using nondenaturing electrophoresis followed by detection of carbonic anhydrase (CA) activity in the gel stained with bromothymol blue, the following carriers of CA were detected: photosystem II, cytochrome  $b_6f$  complex, and ATP synthase. The data favor the assumption that multiple forms of thylakoid carbonic anhydrase take part in the internal proton transfer from the centers of their evolution to the ATP synthase.*





УДК 577.32

В. В. Микуляк, член-кореспондент НАН України О. І. Корнелюк

### Структура і динаміка тирозил-тРНК синтетази *Mycobacterium tuberculosis* у комплексі з інгібітором SB-219383

*Інгібітор SB-219383 та його аналоги є класом потенційних інгібіторів бактеріальних тирозил-тРНК синтетаз. Для дослідження динамічних фармакофорних ознак проведено моделювання молекулярної динаміки тирозил-тРНК синтетази еубактерії *Mycobacterium tuberculosis* у комплексі з інгібітором SB-219383. Показано, що інгібітор зв'язується в активному центрі ферменту, взаємодіючи з ділянкою зв'язування тирозину та фосфатної групи. SB-219383 не взаємодіє з каталітичною петлею KMSKS.*

Тирозил-тРНК синтетаза (TyrRS) є ферментом, який відповідає за приєднання тирозину до відповідної тРНК на дорибосомному етапі синтезу білка [1]. TyrRS еубактерії *Mycobacterium tuberculosis* (*MtTyrRS*) нами розглядається як перспективна мішень для пошуку та розробки нових антибактеріальних інгібіторів, специфічне інгібування цього ферменту повинно істотно пригнічувати ріст патогенних бактерій [2]. Використовуючи базу даних траєкторій молекулярної динаміки (МД) *MtTyrRS*, ми проводимо віртуальний скринінг нових селективних інгібіторів цього ферменту з врахуванням конформаційної рухливості активного центру. Для дизайну інгібіторів важливим етапом є визначення фармакофорних ознак [3].

Для вивчення динамічних фармакофорних дескрипторів ми досліджували *MtTyrRS* у комплексі з інгібітором SB-219383 методом моделювання МД у часових інтервалах 100 нс. Цей інгібітор та його аналоги є класом потенційних та специфічних інгібіторів бактеріальних тирозил-тРНК синтетаз (TyrRS) [4, 5]. Інгібітор SB-219383 показує конкурентну інгібуючу активність проти *S. aureus* TyrRS з концентрацією напівмаксимального інгібування IC<sub>50</sub> 0,6 нМ, для TyrRS людини IC<sub>50</sub> становить 22 мкМ [4]. Сполуку SB-219383 можна охарактеризувати як Tyr-Gly дипептид, в якому положення C<sub>α</sub> атома гліцину є похідним біциклічного цукру [5].

У даній роботі наведено результати дослідження динамічних фармакофорних ознак інгібітора SB-219383 методом моделювання МД у комплексі з *MtTyrRS*. Досліджено формування водневих зв'язків у ході МД та тривалість їх існування. Визначено механізм зв'язування інгібітора в активному центрі ферменту в розчині.

© В. В. Микуляк, О. І. Корнелюк, 2014

Інгібітор зв'язується в активному центрі *MtTyrRS* з ділянкою взаємодії тирозину та фосфатної групи, не заповнюючи кишеню зв'язування з аденіном та не взаємодіючи з каталітичною петлею.

Димер *MtTyrRS* було підготовлено за схемою, описаною в нашій попередній роботі [6]. Для побудови комплексу *MtTyrRS* з інгібітором використано кристалографічну структуру комплексу *S. aureus* TyrRS з SB-219383 (PDB код — 1JII) [7]. Конформацію зв'язування інгібітора в активному центрі *MtTyrRS* отримано шляхом накладання активних центрів ферментів.

Всі обрахунки МД проведені за допомогою програмного забезпечення GROMACS 4.5 [8] з використанням силових полів AMBER ff99SB-ILDN [9] та CHARMM27 [10]. Було отримано щонайменше по три траєкторії МД з кожним силовим полем. Підготовка системи здійснювалася таким чином. Білок був поміщений в бокс з водою типу TIP3P з мінімальною відстанню до стінок боксу 1 нм. Заряд системи було нейтралізовано шляхом додавання іонів  $\text{Na}^+$  та  $\text{Cl}^-$  при концентрації 150 мМ (близька до фізіологічної). Спочатку було проведено мінімізацію вільної енергії системи, а потім врівноважено шляхом прив'язки важких атомів білка до їхніх вихідних позицій. Інтегрування проводилось з кроком у 2 фс. Довжини зв'язків обраховувались за алгоритмом Lincs, електростатичні взаємодії — за алгоритмом PME. Параметр відсічення (cutoff) було виставлено в 1 нм для всіх типів взаємодій. Температура і тиск підтримувались постійними за алгоритмами V-rescale в 310 К та Parrinello–Rahman в 1 атм відповідно. Всі обчислення МД проведено з використанням сервісів віртуальної лабораторії MolDynGrid (<http://moldyngrid.org>), на кластерах ICYB і ISMA Українського національного гріду [11].

Для візуалізації траєкторій та графічного аналізу структур використано програму PyMOL [12]. Середньоквадратичні відхилення (СКВ) і середньоквадратичні флуктуації (СКФ) розраховані за допомогою програм пакета GROMACS *g\_rms* і *g\_rmsf* відповідно. Для схематичного зображення водневих зв'язків між лігандом та ферментом використано програму LigPlot<sup>+</sup> [13].

Для перевірки стабільності димеру *MtTyrRS* у комплексі з інгібітором SB-219383 було визначено СКВ та СКФ  $C_\alpha$  атомів від їхніх початкових координат у ході моделювання МД (рис. 1). СКВ свідчать про стабільність ферменту протягом симуляції МД. Аналіз отриманих СКФ показав, що найбільш рухливими елементами димеру є С-кінцеві домени [14] та неструктуровані каталітичні петлі KMSKS [6].

Щоб оцінити зв'язування ліганду в активному центрі *MtTyrRS*, було пораховано всі водневі зв'язки між інгібітором та ферментом, а також тривалість їх існування протягом всього часу симуляції МД (100 нс) (табл. 1). Інгібітор SB-219383 формує дев'ять водневих зв'язків з амінокислотними залишками активного центру ферменту: Tyr36, Gly38, Asp40, His50, Asp178, Asp196, Gln197 (рис. 2). Тривалість існування водневих зв'язків коливається від 35 до 99% (див. табл. 1), що є свідченням конформаційної рухливості активного центру ферменту та інгібітора в розчині.

Інгібітор SB-219383 зв'язується в активному центрі ферменту, взаємодіючи з ділянкою зв'язування тирозину та фосфатної групи, його розміри менші за розміри тирозиладенілату, тому інгібітор не взаємодіє з каталітичною петлею (рис. 3). Ми припускаємо, що цим обумовлена низька специфічність інгібітора, що призводить до токсичності його для організму людини. В бактеріальних TyrRS мотив KMSKS відіграє важливу роль у каталітичному механізмі, тому інгібітори, які будуть взаємодіяти з цим мотивом, матимуть більшу афінність до бактеріальних TyrRS, ніж до еукаріотичних гомологів [15]. Ми проводимо по-

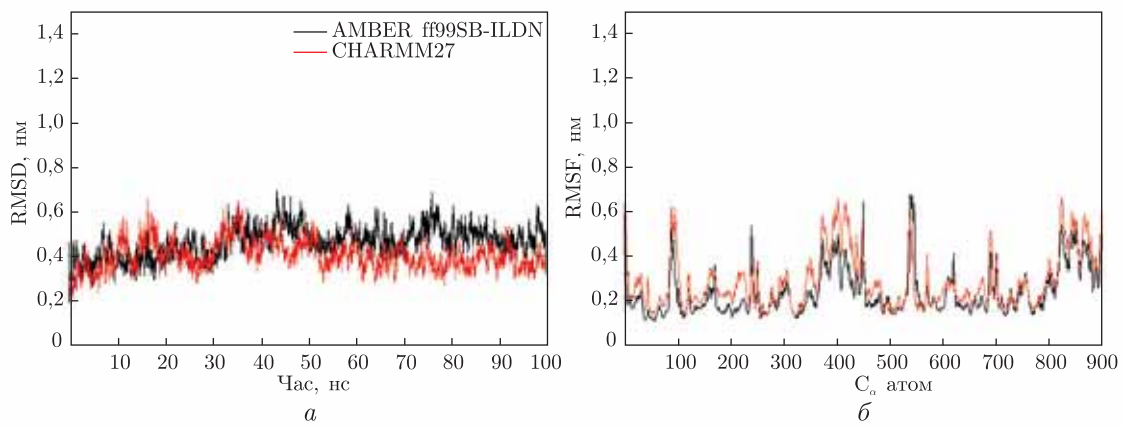


Рис. 1. Середньоквадратичні відхилення (а) та середньоквадратичні флуктуації (б)  $C_{\alpha}$  атомів від початкових структур в ході моделювання МД комплексу *M*TyrRS з інгібітором SB-219383

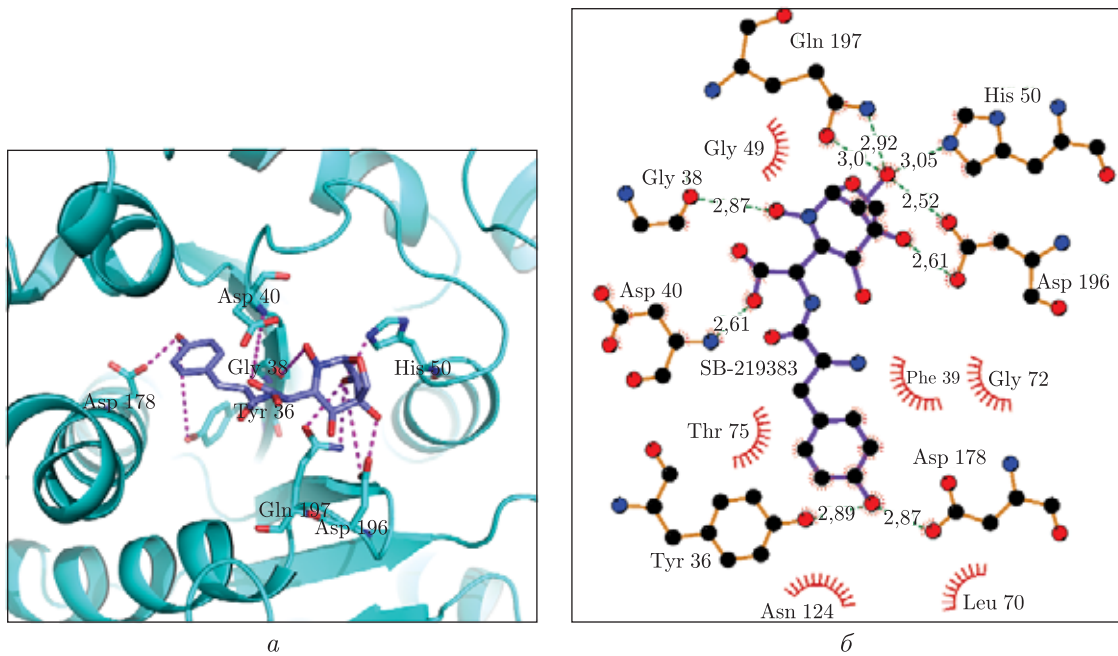


Рис. 2. Інгібітор SB-219383 та амінокислотні залишки активного центру *M*TyrRS, з якими формуються водневі зв'язки (а); схематичне зображення водневих зв'язків інгібітора SB-219383 із залишками активного центру (б)

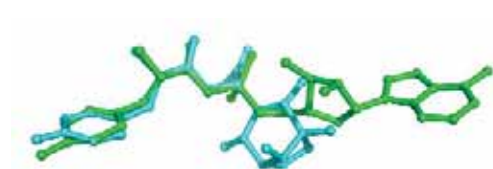


Рис. 3. Накладання просторових структур тирозиладенілату та інгібітора SB-219383. Інгібітор має менші розміри та заповнює в активному центрі кишеню зв'язування з тирозином та фосфатною групою

Таблиця 1. Водневі зв'язки між інгібітором SB-219383 та активним центром *MtTyrRS*. Для кожного зв'язку наведено довжину та тривалість існування протягом 100 нс моделювання МД

Водневі зв'язки <i>MtTyrRS</i> — SB-219383	Довжина, Å	Тривалість існування, %
Tyr36-OH — O13	2,89	37,72
Gly38-O — HO28	2,87	35,47
Asp40-NH — O1	2,61	91,82
His50-NE2H — O32	3,05	67,39
Asp178-OD2 — HO13	2,87	99,26
Asp196-OD1 — HO29	2,61	90,16
Asp196-OD2 — HO32	2,52	92,39
Gln197-OE1 — HO32	3,00	34,39
Gln197-NE2H — O32	2,92	50,47

шук нових селективних інгібіторів з врахуванням рухливості структури активного центру, використовуючи базу даних МД. Дизайн інгібіторів *MtTyrRS* повинен базуватися на подібності до тирозиладенілату та динамічних фармакофорних ознаках, отриманих шляхом моделювання МД димеру *MtTyrRS* у комплексах із субстратами та інгібітором SB-219383.

Таким чином, дослідження динамічних фармакофорних ознак інгібітора SB-219383 методом моделювання МД в комплексі з *MtTyrRS* показало, що інгібітор утворює дев'ять водневих зв'язків, тривалість яких становить 39–99% загальної тривалості симуляції МД. Інгібітор зв'язується в активному центрі *MtTyrRS* з ділянкою взаємодії тирозину та фосфатної групи, не заповнюючи кишеню зв'язування з аденіном та не взаємодіючи з каталітичною петлею. Нові інгібітори повинні взаємодіяти з каталітичним мотивом KFGKS, це надасть їм більшої афінності до бактеріальних TyrRS, ніж до еукаріотичних гомологів.

*Робота підтримана грантом № 15/2013 Державної цільової науково-технічної програми впровадження і застосування грид-технологій на 2009–2013 рр. та грантом № 49/2013 Програми наукових досліджень НАН України “Розробка інтелектуальних суперкомп'ютерних систем сімейства СКІТ, забезпечення їх ефективного функціонування та створення інформаційних технологій, сучасного математичного, програмно-технічного забезпечення для розв'язання складних та надскладних науково-практичних задач (Інтелект)” на 2013–2015 рр.*

1. Bedouelle H. Recognition of tRNA(Tyr) by tyrosyl-tRNA synthetase // *Biochimie*. – 1990. – **72**, No 8. – P. 589–598.
2. Одиноць К. О., Корнелюк О. І. Модель просторової структури тирозил-тРНК синтетази збудника туберкульозу *Mycobacterium tuberculosis* // *Укр. біохім. журн.* – 2008. – № 5. – С. 36–49.
3. Чекман І. С., Небесна Т. Ю., Казакова О. О., Сімонов П. В. Фармакофори: створення лікарських засобів // *Журн. АМН України*. – 2010. – **16**, № 3. – С. 424–437.
4. Stefanska A. L., Coates N. J., Mensah L. M. et al. SB-219383, a novel tyrosyl tRNA synthetase inhibitor from a *Micromonospora* sp. I. Fermentation, isolation and properties // *J. Antibiot. (Tokyo)*. – 2000. – **53**, No 4. – P. 345–350.
5. Houge-Frydrych C. S., Readshaw S. A., Bell D. J. SB – 219383, a novel tyrosyl tRNA synthetase inhibitor from a *Micromonospora* sp. II. Structure determination // *Ibid.* – 2000. – **53**, No 4. – P. 351–356.
6. Мукуляк В. В., Корнелюк О. І. Динамічне формування  $\beta$ -тяжової структури в активному центрі тирозил-тРНК синтетази еубактерії *Mycobacterium tuberculosis* за даними молекулярної динаміки // *Доп. НАН України*. – 2012. – № 5. – С. 158–162.
7. Qiu X., Janson C. A., Smith W. W. et al. Crystal structure of *Staphylococcus aureus* tyrosyl-tRNA synthetase in complex with a class of potent and specific inhibitors // *Protein Sci.* – 2001. – **10**, No 10. – P. 2008–2016.

8. Hess B., Kutzner C., Van Der Spoel D., Lindahl E. GROMACS 4: Algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation // J. Chem. Theory Comput. – 2008. – 4, No 3. – P. 435–447.
9. Hornak V., Abel R., Okur O. et al. Comparison of Multiple Amber Force Fields and Development of Improved Protein Backbone Parameters // Proteins. – 2006. – 65, No 3. – P. 712–725.
10. Bjelkmar P., Larsson P., Cuendet M. et al. Implementation of the CHARMM Force Field in GROMACS: Analysis of Protein Stability Effects from Correction Maps, Virtual Interaction Sites, and Water Models // J. Chem. Theory Comput. – 2010. – 6, No 2. – P. 459–466.
11. Salnikov A. O., Sliusar I. A., Sudakov O. O. et al. Virtual laboratory moldyngrid as a part of scientific infrastructure for biomolecular simulations // Int. J. Computing. – 2010. – 9, No 4. – P. 294–300.
12. The PyMOL Molecular Graphics System, Version 1.3, Schrödinger, LLC.
13. Laskowski R. A., Swindells M. B. LigPlot+: multiple ligand-protein interaction diagrams for drug discovery // J. Chem. Inf. Model. – 2011. – 51. – P. 2778–2786.
14. Микуляк В. В., Корнелюк О. І. Конформаційна рухливість тирозил-тРНК синтетази еубактерії *M. tuberculosis* по даним комп'ютерного моделювання молекулярної динаміки // Фізика живого. – 2011. – 19, № 2. – С. 4–8.
15. Austin J., First E. Comparison of the catalytic roles played by the KMSKS motif in the human and *Bacillus stearothermophilus* tyrosyl-tRNA synthetases // J. Biol. Chem. – 2002. – 277, No 32. – P. 28394–28399.

Інститут високих технологій Київського національного  
університету ім. Тараса Шевченка  
Інститут молекулярної біології і генетики  
НАН України, Київ

Надійшло до редакції 16.12.2013

**В. В. Микуляк**, член-кореспондент НАН України **А. І. Корнелюк**

### **Структура и динамика тирозил-тРНК синтетазы *Mycobacterium tuberculosis* в комплексе с ингибитором SB-219383**

*Ингибитор SB-219383 и его аналоги являются классом потенциальных ингибиторов бактериальных тирозил-тРНК синтетаз. Для исследования динамических фармакофорных признаков проведено моделирование молекулярной динамики тирозил-тРНК синтетазы эубактерии *Mycobacterium tuberculosis* в комплексе с ингибитором SB-219383. Показано, что ингибитор связывается в активном центре фермента, взаимодействуя с участком связывания тирозина и фосфатной группы. SB-219383 не взаимодействует с каталитической петлей KMSKS.*

**V. V. Mykuliak**, Corresponding Member of the NAS of Ukraine **A. I. Kornelyuk**

### **Structure and dynamics of *Mycobacterium tuberculosis* tyrosyl-tRNA synthetase in complex with SB-219383 inhibitor**

*Inhibitor SB-219383 and its analogues are a class of potential inhibitors of bacterial tyrosyl-tRNA synthetases. To study the dynamic pharmacophore features, we have performed molecular dynamics simulations of *M. tuberculosis* tyrosyl-tRNA synthetase in complex with SB-219383 inhibitor. The inhibitor binds to the active center of the enzyme interacting with the region of binding of tyrosine and a phosphate group. SB-219383 does not interact with the catalytic KMSKS loop.*





УДК 616.314.25-007.4

Академик НАН України **Я. М. Григоренко, А. Я. Григоренко,**  
**Н. Н. Тормахов, Д. Ю. Шпак, П. С. Флис**

## **Методика лечения гнатической формы мезиального прикуса**

*С помощью методов биомеханики построена математическая модель работы лицевой маски и определены ее опорные реакции. Опорные реакции получены для разных величин угла наклона вектора усилия натяжения резиновой тяги, прилагаемого к верхней челюсти.*

Мезиальная окклюзия зубных рядов у детей по частоте распространения занимает значительное место среди прочих зубочелюстных аномалий. По литературным данным, частота распространения мезиальной окклюзии колеблется от 2,8 до 7,6% случаев среди зубочелюстных аномалий [1]. Распространенность мезиальной окклюзии вызывает необходимость совершенствовать методики лечения этой зубочелюстной аномалии.

Зубоальвеолярная форма мезиальной окклюзии характеризуется несоответствием размеров зубных рядов и апикальных базисов. Этот вид окклюзии развивается вследствие аномалии положения зубов, смещения альвеолярного отростка и вынужденного смещения нижней челюсти вперед. При мезиальной окклюзии передний щечный бугор первого верхнего моляра расположен позади поперечной фиссуры одноименного антагониста, а в переднем отделе часто наблюдается обратное резцовое перекрытие либо прямое смыкание режущих краев резцов. Различают две формы мезиальной окклюзии — зубоальвеолярную и гнатическую. При гнатической мезиальной окклюзии наблюдается укорочение базиса верхней челюсти и ее дистальное расположение. Данная аномалия связана с удлинением тела нижней челюсти и ее ветвей, а также с передним расположением головки нижней челюсти в височно-нижнечелюстном суставе [2].

Лечение мезиальной окклюзии заключается в восстановлении правильных окклюзионных соотношений в переднем и задних отделах зубочелюстного аппарата. В процессе лечения мезиальной окклюзии используют внутри- и внеротовые устройства. Внутриротовые устройства бывают съёмными и несъёмными. Из съёмных внутриротовых функционально

---

© Я. М. Григоренко, А. Я. Григоренко, Н. Н. Тормахов, Д. Ю. Шпак, П. С. Флис, 2014



и механически воздействующих аппаратов наибольшее применение нашли аппараты Брюкля, пластинки с винтом и протрагирующими пружинами, пластинки с секторальным распилом и винтом для удлинения верхнего зубного ряда, регуляторы функции Френкеля, пластинки для нижней челюсти с вестибулярной дугой, а также другие аппараты. Недостатком съемной аппаратуры является то, что перемещение зубов с помощью этих устройств часто сопровождается их наклоном. Указанный недостаток отсутствует у несъемных внутриротных устройств. Из несъемных внутриротных устройств, используемых при лечении мезиальной окклюзии, наибольшее применение нашли дуги Энгля, а также эджуайз- и брекет-техника.

Лечение сложных зубочелюстных патологий вызвало необходимость применения внеротовых аппаратов. Из внеротовых аппаратов при лечении гнатической формы мезиального прикуса применяются подбородочная праща, а также лицевые маски различной конструкции [3, 4]. Эти устройства используют для сдерживания роста нижней челюсти и оптимизации роста верхней. Широкое применение нашли лицевые маски Delaire в комплексе с брекет-системой на верхней челюсти [3, 5].

Целью данной работы является разработка математической модели работы комплекса из лицевой маски и брекет-системы и разработка рекомендаций по использованию этих устройств при лечении гнатической формы мезиальной окклюзии.

**Материал и методы исследования.** Построение математической модели работы комплекса, состоящего из лицевой маски и брекет-системы, производится методами теоретической механики и механики деформируемого твердого тела. Так как вес лицевой маски мал по сравнению с ортодонтическим усилием, которое она создает, при определении опорных реакций им пренебрегали.

**Результаты исследования и их обсуждение.** В стоматологии все большее применение находят методы математического моделирования [6–8]. Рассмотрим механико-математические аспекты лечения гнатической формы мезиальной окклюзии с помощью комплекса, состоящего из лицевой маски и брекет-системы. Для лечения гнатической формы мезиальной окклюзии необходимо сдерживать рост нижней челюсти и стимулировать рост верхней. Чтобы осуществить это, к верхнему зубному ряду необходимо приложить постоянно действующее усилие вытягивания, а к нижней челюсти — усилие сжатия.

Комплекс для лечения гнатической формы мезиальной окклюзии состоит из лицевой маски 1 и брекет-системы 2, которые соединены эластичной тягой 3 (см. рис. 1). Брекеты прикрепляют на вестибулярной поверхности верхнего зубного ряда, а к брекетам — ортодонтическую дугу, которая связывает зубной ряд в единое целое.

Лицевая маска опирается на лоб и подбородок пациента и удерживается благодаря наличию усилия растяжения в эластичной тяге. Верхняя опора лицевой маски фиксируется относительно каркаса винтом. В средней части каркаса закреплена поперечная планка, на которую накинута эластичная резиновая тяга 3. Нижняя опора лицевой маски может свободно перемещаться относительно оси каркаса. Подвижность нижней опоры позволяет пациенту открывать и закрывать рот при надетой лицевой маске. Когда пациент открывает рот, нижняя опора перемещается вниз, к краю каркаса, а при закрывании рта — вверх.

На рис. 2 показана расчетная схема сил, действующих на каркас лицевой маски, который контактирует с нижней и верхней опорами в точках  $O$  и  $A$ . Силы, действующие на каркас лицевой маски, будем рассматривать в декартовой системе координат  $xOy$ . Ось  $y$  этой системы координат направлена параллельно касательной к каркасу в точке  $O$ . Каркас лицевой маски шарнирно крепится к верхней опоре в точке  $A$ . В точке  $A$  со стороны опоры

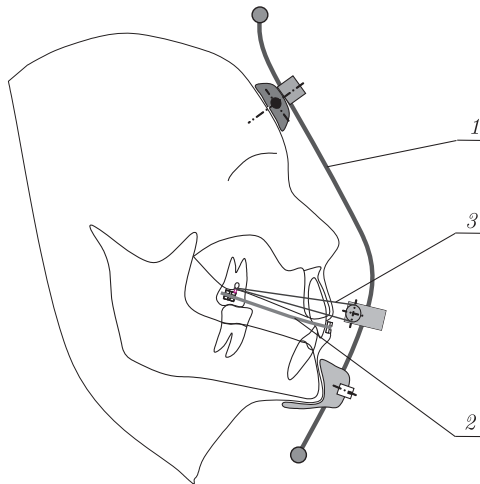


Рис. 1. Комплекс для лечения гнатической формы мезиального прикуса

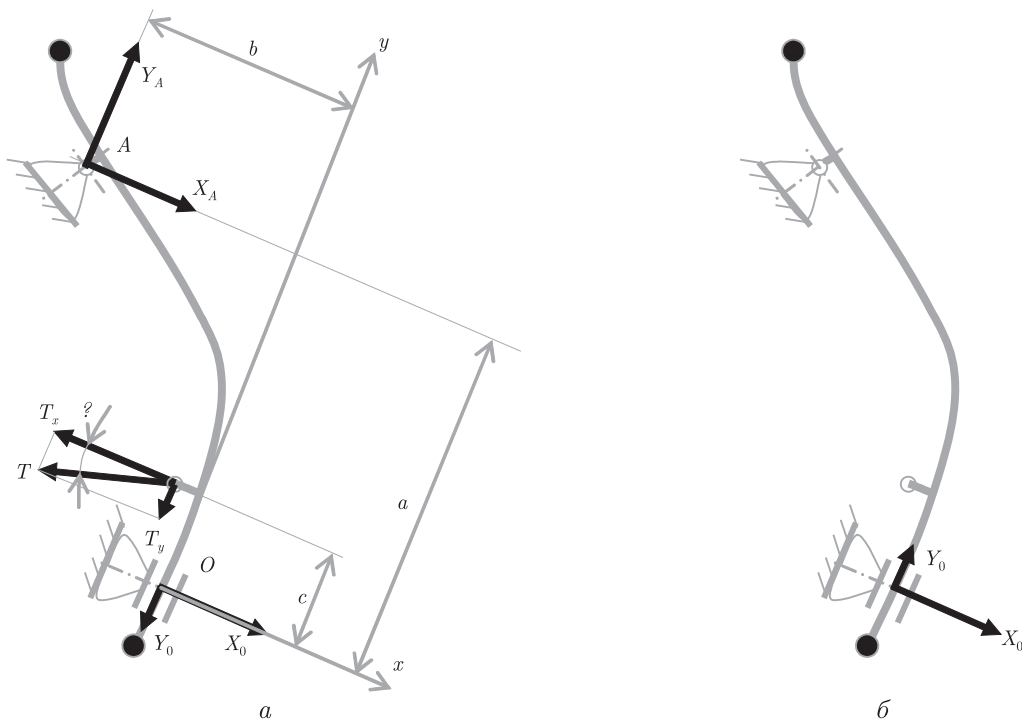


Рис. 2. Расчетная схема каркаса лицевой маски

на каркас действует опорная реакция, которую можно разложить на две составляющие, направленные параллельно осям координат, —  $X_A$  и  $Y_A$ . Со стороны нижней опоры в направлении оси  $x$  на каркас действует составляющая реакции опоры  $X_O$ . Так как в направлении оси  $y$  нижняя опора относительно каркаса перемещается свободно, то составляющая реакции нижней опоры  $Y_O$  в направлении оси  $y$  будет изменять свое направление. Реакция нижней опоры  $Y_O$  в направлении оси равна:

$$\begin{aligned}
&(kX_O), \text{ если пациент закрывает рот (рис. 2, а),} \\
&Y_O = 0, \text{ если опора не перемещается относительно каркаса,} \\
&(-kX_O), \text{ если пациент открывает рот (рис. 2, б),}
\end{aligned}
\tag{1}$$

где  $k$  — коэффициент трения–скольжения каркаса относительно опоры.

Со стороны брекетов на каркас под углом  $\alpha$  к отрицательному направлению оси  $x$  действуют усилие тяги  $T$ , которое также можно разложить на составляющие, действующие вдоль осей координат,

$$T_x = T \cos \alpha, \quad T_y = T \sin \alpha \tag{2}$$

Для определения опорных реакций каркаса составим систему уравнений равновесия каркаса для случая закрывания рта пациентом (рис. 2, а). Система уравнений равновесия каркаса включает равенства сил, действующих на каркас вдоль осей  $x$  и  $y$ , а также сумму моментов всех сил, действующих в плоскости  $xOy$ :

$$\begin{aligned}
X_A + X_O &= T_x, \\
kX_O + Y_A &= T_y, \\
aX_A + bY_A &= cT_x.
\end{aligned}
\tag{3}$$

Системе уравнений (3) соответствует следующее матричное уравнение:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & k & 1 \\ a & 0 & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_A \\ X_O \\ Y_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_x \\ T_y \\ cT_x \end{pmatrix}, \tag{4}$$

где  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & k & 1 \\ a & 0 & b \end{pmatrix}$  — матрица коэффициентов системы уравнений;  $\begin{pmatrix} X_A \\ X_O \\ Y_A \end{pmatrix}$  — вектор опорных реакций;  $(T) = \begin{pmatrix} T_x \\ T_y \\ cT_x \end{pmatrix}$  — вектор внешней нагрузки.

Для решения системы (3) необходимо обратить матрицу коэффициентов уравнения. Определитель матрицы коэффициентов системы уравнений (3) равен  $(a + kb)$ , а обратная матрица коэффициентов системы уравнений имеет вид

$$\begin{pmatrix} kb & -b & 1 \\ a & b & -1 \\ -ka & a & k \end{pmatrix} / (a + kb). \tag{5}$$

Решая систему уравнений (3) относительно неизвестных реакций опор, получим следующее решение для случая, когда пациент закрывает рот:

$$\begin{pmatrix} X_A \\ X_O \\ Y_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(kb + c)T_x - bT_y}{a + kb} \\ \frac{(a - c)T_x + bT_y}{a + kb} \\ \frac{k(c - a)T_x + aT_y}{a + kb} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

В случае открытия рта знак перед коэффициентом трения в (2) и (3) меняется на противоположный и реакции опор будут определяться следующими выражениями:

$$\begin{pmatrix} X_A \\ X_O \\ Y_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(-kb + c)T_x - bT_y}{a - kb} \\ \frac{(a - c)T_x + bT_y}{a - kb} \\ \frac{-k(c - a)T_x + aT_y}{a - kb} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

В состоянии покоя, когда рот не двигается, усилие трения будет равно нулю, и выражение для опорных реакций примет вид

$$\begin{pmatrix} X_A \\ X_O \\ Y_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{cT_x - bT_y}{a} \\ \frac{(a - c)T_x + bT_y}{a} \\ T_y \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Определим силы, действующие со стороны опор маски на подбородок и лоб пациента. Для этого зададимся величинами параметров  $a, b, c, \alpha$ , которые входят в выражения (2)–(8) для конкретного клинического случая  $a = 122$  мм,  $b = 76$  мм,  $c = 32$  мм и усилием  $T = 1$  Н. Коэффициент трения — скольжения каркаса по нижней опоре примем равным  $k = 0,1$ .

Подставляя значения  $T_x, T_y, k$  и параметров  $a, b, c$  в (4)–(8), получим для ряда значений угла  $\alpha$  значения опорных реакций  $X_A, X_O, Y_A, Y_O$ . В табл. 1 представлены результаты расчета опорных реакций  $X_A, X_O, Y_A, Y_O$  (столбцы 4–7), рассчитанные для  $T = 1$  Н. Угол наклона  $\alpha$  между вектором усилия тяги и отрицательным направлением оси  $x$  представлен в третьем столбце табл. 1.

Таблица 1

№ п/п	Движение нижней челюсти	$\alpha^\circ$	$X_A, \text{Н}$	$Y_A, \text{Н}$	$X_O, \text{Н}$	$Y_O, \text{Н}$
1	Закрытие рта, формула (6)	30	-0,03	0,41	0,89	0,09
2		20	0,09	0,26	0,85	0,09
3		10	0,2	0,1	0,79	0,08
4		0	0,31	-0,07	0,69	0,07
5		-10	0,4	-0,23	0,58	0,06
6		-20	0,49	-0,39	0,45	0,05
7	Состояние покоя, формула (8)	30	-0,08	0,5	0,95	0
8		20	0,03	0,34	0,91	0
9		10	0,15	0,17	0,83	0
10		0	0,26	0	0,74	0
11		-10	0,37	-0,17	0,62	0
12		-20	0,46	-0,34	0,48	0
13	Открывание рта, формула (7)	30	-0,15	0,6	1,01	-0,1
14		20	-0,03	0,44	0,97	-0,1
15		10	0,09	0,26	0,89	-0,09
16		0	0,21	0,08	0,79	-0,08
17		-10	0,33	-0,11	0,66	-0,07
18		-20	0,43	-0,29	0,51	-0,05

Усилия  $T$  и  $X_O$ , которые направлены на исправление гнатической формы мезиального прикуса, можно назвать “полезными”. Усилие  $T$ , действующее в мезиальном направлении, создается натяжением тяги и приложено через брекеты к верхнему зубному ряду. Усилие  $X_O$ , сдерживающее рост нижней челюсти, приложено в дистальном направлении. Из таблицы видно, что усилие  $X_O$  достигает максимальных величин при максимальном угле  $\alpha$  наклона вектора  $T$ . При открывании рта усилие  $X_O$  увеличивается, а при закрывании — уменьшается.

Составляющая опорной реакции  $Y_O$  при открывании рта принимает отрицательные значения, а при закрывании — положительное. Когда нижняя челюсть не двигается, эта составляющая равна нулю. Опорная реакция лицевой маски в точке  $A$  пропорциональна усилию  $T$  и меняется в зависимости от угла  $\alpha$ . Чем больше угол  $\alpha$ , тем больше составляющая  $Y_A$  и меньше составляющая  $X_A$ . При закрывании рта составляющая  $Y_A$  уменьшается, а составляющая  $X_A$  увеличивается. Открывание рта приводит, соответственно, к увеличению составляющей опорной реакции  $Y_A$  и уменьшению составляющей  $X_A$ .

Таким образом, с помощью методов биомеханики построена математическая модель работы комплекса, состоящего из лицевой маски и брекет-системы, для лечения гнатической формы мезиальной окклюзии. Опорные реакции комплекса на лицо пациента получены для разных величин угла резиновой тяги, передающей ортодонтическое усилие к верхней челюсти. Преимуществом лицевой маски является то, что она одновременно создает два “полезных” усилия — усилие сдерживания роста нижней челюсти и усилие вытягивания верхней челюсти вперед. Усилие, создаваемое резиновой тягой и приложенное к верхнему зубному ряду, направлено мезиально, а опорная реакция, приложенная к нижней челюсти, действует в дистальном направлении. “Полезное” усилие, приложенное к нижней челюсти, увеличивается с увеличением угла наклона резиновой тяги. При открывании рта это усилие увеличивается, а при закрывании — уменьшается. Составляющая опорной реакции, действующая на подбородок вдоль касательной к каркасу, при открывании рта направлена вниз, а при закрывании — вверх. В состоянии покоя, когда нижняя челюсть не двигается, эта составляющая равна нулю. Опорная реакция лицевой маски на лоб пропорциональна усилию резиновой тяги и меняется в зависимости от его угла наклона.

Приведенная математическая модель может быть использована при планировании лечения гнатической формы мезиального прикуса пациентов.

1. *Латий А. А.* Изменения в височно-нижнечелюстном суставе при действии на нижнюю челюсть дистально направленной внеротовой тяги // *Стоматология*. – 1988. – № 2. – С. 19–21.
2. *Аникиенко А. А., Лаботкина Р. О., Богдашевская В. Б.* Цефалометрические нормативы черепа у детей 7–12 и 12–15 лет в помощь диагностике нарушений развития черепа: Методич. пособие. – Москва, 1989. – 19 с.
3. *Зарубина Е. А.* Особенности лечения мезиальной окклюзии современной несъемной ортодонтической техникой // *Актуальные пробл. ортопедич. стоматологии: Мат-лы науч.-практ. конф.* – Москва, 2002. – С. 84–88.
4. *Bishara S. E.* Textbook of Orthodontics. – W/B/Saunderscompany/. – 2001. – 592 p.
5. *Куроедова В. Д., Кулиш Н. В.* Основы техники прямой дуги. – Уч.-метод. пособие. – Полтава: Верстка, 2008. – 108 с.
6. *Григоренко О. Я., Джарбуэ М. М., Дорошенко С. И. и др.* Моделирование процесса расширения зубных дуг на основе ортодонтического устройства, оснащенного упругим элементом // *Доп. НАН України*. – 1999. – № 2. – С. 74–78.
7. *Григоренко О. Я., Дорошенко С. И., Жачко Н. І. и др.* Моделивання процесу повороту зуба при апаратному лікуванні // *Там само*. – 1999. – № 2. – С. 74–78.

8. Григоренко Я. М., Григоренко А. Я., Тормахов Н. Н. и др. О форме зубных дуг при ортогнатической окклюзии // Там само. – 2010. – № 1. – С. 188–194.

*Институт механики им. С. П. Тимошенко  
НАН Украины, Киев  
Национальный медицинский университет  
им. А. А. Богомольца, Киев*

*Поступило в редакцию 07.11.2013*

**Академік НАН України Я. М. Григоренко, О. Я. Григоренко,  
М. М. Тормахов, Д. Ю. Шпак, П. С. Фліс**

### **Методика лікування гнатичної форми мезіального прикусу**

*За допомогою методів біомеханіки побудовано математичну модель роботи лицьової маски і визначено її опорні реакції. Опорні реакції отримані для різних величин кута нахилу вектора зусилля натягу гумової тяги, що прикладається до верхньої щелепи.*

**Academician of the NAS of Ukraine Ya. M. Grigorenko, A. Ya. Grigorenko,  
N. N. Tormakhov, D. Yu. Shpak, P. S. Flis**

### **A treatment method for the gnatic form of the mesial occlusion**

*By the methods of biomechanics, a mathematical model of the work of a facepiece is built, and its supporting reactions are determined. Supporting reactions are got for various slope angles of the force vector of a rubber pull applied to the supramaxilla.*



О. Г. Федорчук, Г. Д. Льон, Ю. Р. Якшибаєва, Г. В. Горбик,  
О. М. Пясковська

## Чутливість клітин карциноми легені Льюїса LLC та LLC/R9 до цитотоксичної дії природних кілерних клітин та макрофагів мишей C57BL/6 *in vitro*

(Представлено академіком НАН України В. Ф. Чехуном)

Проведене порівняльне дослідження чутливості клітин вихідного (LLC) та хіміорезистентного (LLC/R9) варіантів карциноми легені Льюїса до несенсибілізованих макрофагів та природних кілерних клітин інтактних мишей C57BL/6 *in vitro*. Показано, що формування резистентності клітин карциноми легені Льюїса до цисплатину супроводжується підвищенням їх чутливості до цитотоксичної дії природних кілерних клітин і зниженням чутливості до цитотоксичної дії макрофагів. Можливою причиною підвищеної чутливості цих клітин до цитотоксичної дії природних кілерів може бути знижений рівень експресії молекул I класу ГКГ. Знижена чутливість клітин хіміорезистентного варіанта до цитотоксичної дії несенсибілізованих макрофагів асоційована з підвищеною здатністю до аутофагії.

Відомо, що біологічні властивості пухлинних клітин впливають на характер взаємодії пухлини та організму, що визначає особливості перебігу пухлинного процесу [1–3]. З одного боку, в процесі росту пухлини відбувається імуноселекція її клітин, здатних уникнути імунного нагляду. Такі клітини характеризуються зниженим рівнем експресії компонентів процесингу і презентації ендогенних антигенів: молекул I класу головного комплексу гістосумісності (ГКГ), компонентів протеасомного комплексу, білків-транспортів тощо [4]. З іншого — пухлинні клітини виробляють низку чинників, насамперед цитокінів і хемокінів, які модулюють функції ефекторних клітин як уродженого, так і адаптивного імунітету, формуючи в такий спосіб імносупресивне мікрооточення [5].

Карцинома легені Льюїса вважається низькоімуногенною пухлиною [6]. Нами було схарактеризовано два її варіанти: LLC — отриманий із вихідного штаму та LLC/R9 — хіміорезистентний варіант, отриманий після дев'яти курсів хіміотерапії *cis*-DDP. LLC/R9 у порівнянні з LLC характеризується високою швидкістю росту первинної пухлини, високим ангіогенним та низьким метастатичним потенціалами [7, 8]. Ранні стадії росту LLC/R9, на відміну від таких LLC, супроводжуються гематологічними порушеннями, асоційованими з високим рівнем продукції пухлинними клітинами VEGF [9]. Високий рівень імуноглобуліну G у сироватці крові тварин з LLC/R9 дозволяє припустити більшу імуногенність клітин цього варіанта щодо такої клітин вихідного варіанта [10]. Відомо, що набуття пухлинними клітинами лікарської резистентності в багатьох випадках асоціюється з реверсією їх чутливості до цитотоксичної дії природних кілерних клітин [11, 12].

У даному повідомленні дана оцінка чутливості клітин LLC та LLC/R9 до цитотоксичної дії природних кілерних клітин та макрофагів мишей C57BL/6 *in vitro*.

**Матеріали та методи дослідження.** Дослідження проводили на 20-ти мишах-самцях лінії C57BL/6 віком 2–2,5 міс. з масою 18–22 г розведення віварію (Інститут експерименталь-

ної патології, онкології і радіобіології ім. Р. Є. Кавецького НАН України). Всі маніпуляції виконувались, згідно з міжнародними правилами роботи з дослідними тваринами.

Клітинами-ефекторами (КЕ) слугували мононуклеарні лейкоцити селезінки та перитонеальні макрофаги (ПМ) мишей. Мононуклеари виділяли з суспензії клітин селезінки шляхом центрифугування в градієнті щільності (1,077 г/см<sup>3</sup>) фікол-верографіну. Для отримання ПМ у черевну порожнину тварин вводили 5 мл середовища 199 ("Sigma", США) з гепарином (5 Од/мл) з подальшим проведенням масажу передньої стінки черевної порожнини впродовж 10 хв. Потім відбирали перитонеальний ексудат, що утворився, і ще двічі промивали черевну порожнину свіжими порціями середовища 199. Отриману суспензію клітин двічі відмивали за допомогою центрифугування (200 g, 10 хв), суспендували в 1 мл середовища RPMI 1640 ("Sigma", США) з додаванням 10% ембріональної телячої сироватки (ЕТС, "Sigma", США), розливали аліквотами по 3,5 мл у пластикові чашки Петрі діаметром 6 см та інкубували впродовж 45 хв у термостаті при 37 °С. Суспензію неадгезованих клітин зливали та двічі обережно промивали чашки Петрі розчином Хенкса ("Sigma", США). Далі вливали розчин Хенкса з 0,02% ЕДТА і переносили чашки Петрі на лід (10–15 хв). Після цього змивали з дна фракцію адгезованих клітин, переважно представлених ПМ. Суспензію ПМ осаджували шляхом центрифугування (200 g, 10 хв) та суспендували в повному середовищі культивування такого складу: середовище RPMI 1640, 10% ЕТС, 2 ммоль/л L-глутаміну і 40 мкг/мл гентаміцину сульфату. Підраховували кількість життєздатних ПМ і доводили до концентрації  $1 \cdot 10^6$  кл./мл.

Клітинами-мішенями (КМ) слугували LLC, LLC/R9 та чутлива до цитотоксичної дії природних кілерних клітин мишей лінія YAC-1 як контроль [13]. КМ культивували в повному середовищі при 37 °С у вологій атмосфері 5% CO<sub>2</sub>.

Цитотоксичну активність ефекторних клітин імунної системи визначали методом точної цитофлуориметрії як описано в науковій публікації [14]. Для цього мічені 5(6)-карбоксифлуоресцеїндацетат-сукцинілміділ ефіром ("Fluka", Німеччина) КМ та КЕ вносили в лунки 96-лункового круглодонного планшета в об'ємі 200 мкл повного культурального середовища у співвідношенні 40 : 1, 20 : 1 або 10 : 1. Після центрифугування (50 g, 5 хв) клітини інкубували впродовж 4 год (мононуклеари селезінки) або 18 год (ПМ) при 37 °С у вологій атмосфері 5% CO<sub>2</sub>. По закінченні інкубації суспензію клітин переносили в цитометричні пробірки, додавали пропідій йодид ("Fluka", Німеччина) у кінцевій концентрації 2,5 мкг/мл.

Підрахунок мертвих КМ проводили за допомогою проточного цитофлуориметра FACScan ("Becton Dickinson", США) за допомогою програми "Cell Quest". Цитотоксичну активність оцінювали з використанням індексу цитотоксичності (Щ, %):

$$\text{Щ} = \frac{D - K}{Z - K} \cdot 100\%,$$

де D — кількість мертвих КМ в дослідній пробі (КЕ + КМ); K — кількість мертвих КМ в контрольній пробі (КМ); Z — загальна кількість КМ, що підрахована.

Для статистичної обробки отриманих даних використовували пакети статистичних програм OriginLab 8.5 та Statistica 8.0.

**Результати та їх обговорення.** Відомо, що цитотоксичну дію проти пухлинних клітин справляють клітини трьох основних популяцій: природні кілерні клітини, M1 — макрофаги та CD8 + цитотоксичні Т-лімфоцити. Клітини перших двох популяцій належать до ефекторів вродженого імунітету та здатні до лізису пухлинних клітин без попередньої

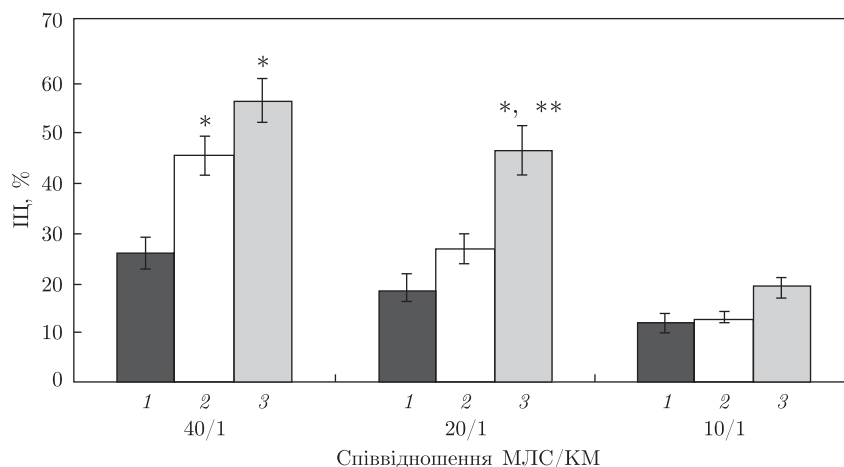


Рис. 1. Чутливість клітин LLC/R9 до цитотоксичної дії мононуклеарних лейкоцитів селезінки.  
 Тут і на рис. 2: \* — розбіжності при порівнянні з цитотоксичністю проти клітин YAC-1 в аналогічних умовах статистично вірогідні ( $p < 0,05$ ); \*\* — розбіжності при порівнянні з цитотоксичністю проти клітин LLC в аналогічних умовах статистично вірогідні ( $p < 0,05$ )

сенсibilізації. Зниження рівня експресії молекул I класу ГКС робить клітини нечутливими до дії ефекторів адаптивного імунітету (CD8 + цитотоксичних Т-лімфоцитів), однак спричиняє посилення чутливості до цитотоксичної дії природних кілерних клітин, цитотоксичними чинниками яких є перфोरини та гранзими. Хіміорезистентність пухлинних клітин може супроводжуватися посиленням їх чутливості до цитотоксичної дії природних кілерних клітин [11, 12].

На рис. 1. при порівнянні цитотоксичної активності мононуклеарних лейкоцитів селезінки (МЛС) інтактних мишей лінії C57BL/6 відносно до клітин YAC-1 (1) LLC (2) й LLC/R9 (3) було встановлено, що при співвідношенні KE : KM 40 : 1 цитотоксичність клітин селезінки проти клітин LLC й LLC/R9 була вірогідно вищою (в 1,73 та 2,16 раза відповідно) щодо такої проти клітин YAC-1. При співвідношеннях KE : KM 20 : 1 і 10 : 1 між цитотоксичністю клітин селезінки проти клітин LLC й YAC-1 істотних відмінностей не виявлено. При цьому цитотоксичність проти клітин LLC/R9 була вірогідно вищою при порівнянні з такою проти LLC або YAC-1.

Отже, клітини LLC/R9 характеризуються підвищеною чутливістю до цитотоксичної дії природних кілерних клітин порівняно з клітинами вихідної лінії та YAC-1. Активація цитотоксичної дії природних кілерів відносно пухлинних клітин значною мірою залежить від рівня експресії молекул ГКГ. Отримані результати дозволяють припустити, що клітини хіміорезистентного варіанта карциноми легені Льюїса характеризуються зниженим рівнем експресії молекул I класу ГКГ.

Механізм цитотоксичної дії макрофагів відносно пухлинних клітин істотно відрізняється від такої у природних кілерних клітин. Цитотоксичними чинниками макрофагального походження виступають: фактор некрозу пухлин- $\alpha$ ; трансформуючий фактор росту- $\beta$ ; реактивні форми кисню й азоту [15].

При дослідженні чутливості клітин YAC-1 (1), LLC (2) й LLC/R9 (3) до дії макрофагів, проілюстрованих на рис. 2, було встановлено, що цитотоксична активність ПМ інтактних мишей проти YAC-1 залежить від співвідношення KE : KM — при збільшенні кількості KE їх цитотоксичність знижується. Стосовно клітин карциноми легені Льюїса спостерігалась

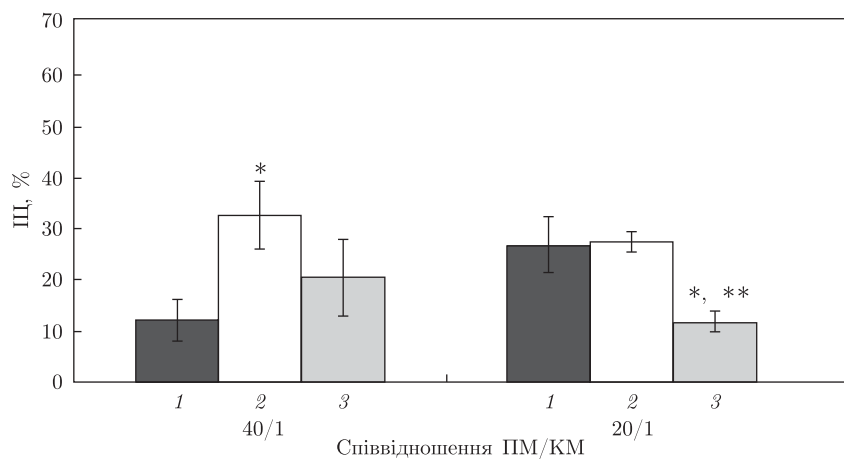


Рис. 2. Чутливість клітин LLC/R9 до цитотоксичної дії перитонеальних макрофагів

зворотна картина — при збільшенні кількості КЕ індекс цитотоксичності ПМ проти клітин LLC й LLC/R9 збільшується. При співвідношенні КЕ : КМ 20 : 1 чутливість клітин хіміорезистентного варіанта карциноми легені Льюїса до цитотоксичної дії ПМ вірогідно знижується у порівнянні з такою клітин вихідної лінії.

Зважаючи на біологічні особливості клітин LLC/R9 (високий рівень продукції VEGF, підвищена швидкість споживання глюкози та високий рівень індукованого гіпоксією апоптозу, можна припустити, що вони здатні пригнічувати цитотоксичну активність макрофагів і/або поляризувати їх до толерогенної протизапальної дії.

Іншим з можливих пояснень резистентності клітин-мішеней LLC/R9 до цитотоксичної дії макрофагів черевної порожнини можуть бути особливості захисту їх від продуктованих макрофагами активних форм кисню та оксиду азоту. Відомо, що одними з основних мішеней реактивних форм кисню в злоякісно трансформованій клітині є лізосоми. Оксидативний стрес спричиняє дестабілізацію мембрани лізосоми, вивільнення лізосомальних ферментів і ушкодження клітини. З метою захисту від тривалого оксидативного стресу в пухлинній клітині, як правило, активується процес аутофагії. При цьому тривалий оксидативний стрес призводить до так званої аутофагічної загибелі клітини, яка класифікується на сьогодні як споріднений апоптозу вид програмованої клітинної загибелі [16]. У попередніх дослідженнях нами було показано підвищену здатність клітин LLC/R9 до аутофагії як в умовах гіпоксії, так і в умовах нормоксії на фоні метаболічного стресу щодо клітин LLC [7].

Таким чином, формування резистентності клітин карциноми легені Льюїса до дисплатину супроводжується зміною їх чутливості до цитотоксичної дії ефекторів протипухлинного імунітету. При цьому знижена чутливість клітин хіміорезистентного варіанта до цитотоксичної дії несенсибілізованих макрофагів асоційована з підвищеною здатністю до аутофагії. Можливою причиною підвищеної чутливості цих клітин до цитотоксичної дії природних кілерів може бути знижений рівень експресії молекул I класу ГКГ.

1. Кавецкий П. Е. Взаимодействие организма и опухоли. — Київ: Наук. думка, 1977. — 243 с.
2. Осинский С., Вагнелъ П. Микрофизиология опухолей. — Київ: Наук. думка, 2009. — 253 с.
3. Aptsiauri N., Cabrera T., Garcia-Lora A. et al. MHC class I antigens and immune surveillance in transformed cells // Int. Rev. Cytol. — 2007. — **256**. — P. 139–189.
4. Schreiber R. D., Old L. J., Smyth M. J. Cancer immunoeediting: integrating immunity's roles in cancer suppression and promotion // Science. — 2011. — **331**. — P. 1565–1570.

5. *Snodgrass M. J., Morahan P. S., Kaplan A. M.* Histopathology of the host response to Lewis lung carcinoma: modulation by pyran // *J. Natl. Cancer Inst.* – 1975. – **55**, No 2. – P. 455–462.
6. *Колесник Д. Л.* Біологічні властивості модифікованого варіанту карциноми легені Льюїс, асоційовані з пухлинним ангиогенезом: Автореф. дис. ... канд. біол. наук. – Київ, 2010.
7. *Pyaskovskaya O. N., Dasyukevich O. I., Kolesnik D. L. et al.* Changes in VEGF level and tumor growth characteristics during Lewis lung carcinoma progression towards cis-DDP resistance // *Exp. Oncol.* – 2007. – **29**, No 3. – P. 197–202.
8. *Fedorchuk O. G., Pyaskovskaya O. M., Skivka L. M. et al.* Paraneoplastic syndrome in mice bearing high-angiogenic variant of Lewis lung carcinoma: Relations with tumor derived VEGF // *Cytokine.* – 2012. – **57**, No 1. – P. 81–88.
9. *Федорчук О. Г.* Імуногенні властивості високо-ангіогенного варіанту карциноми легені Льюїс: зв'язок з метастатичним потенціалом // *Мед. хімія.* – 2012. – **14**. – С. 5–10.
10. *Sugimoto Y., Hirakawa Y., Tanaka N. et al.* Transplantability and Sensitivity to Natural Killer Cells of Aclarubicin-resistant Murine Lymphoma // *Cancer Res.* – 1986. – **46**. – P. 5646–5648.
11. *Berezhnaya N. M., Belova O. B., Vinnichuk Y. D., Tarutinov V. I.* Expression of E-cadherin in drug resistant human breast cancer cells and their sensitivity to lymphokine-activated lymphocytes action // *Exp. Oncol.* – 2009. – **31**, No 4. – P. 242–245.
12. *Kiessling R., Klein E., Wigzell H.* "Natural" killer cells in the mouse. I. Cytotoxic cells with specificity for mouse Moloney leukemia cells. Specificity and distribution according to genotype // *Eur. J. Immunol.* – 1975. – **5**, No 2. – P. 112–117.
13. *Пинегин Б. В., Ярилин А. А., Симонова А. В. и др.* Применение проточной цитометрии для оценки функциональной активности иммунной системы человека. Пособие для врачей лаборантов. – Москва: Б. и., 2001. – 51 с.
14. *Janeway C. A., Travers P., Walport M., Shlomchik M.* Immunology: the immune system in health & disease, 5 ed. – New York: Garlandpress, 2005. – 732 p.
15. *Chen Y, McMillan-Ward E., Kong J. et al.* Oxidative stress induces autophagic cell death independent of apoptosis in transformed and cancer cells // *Cell Death Differ.* – 2008. – **15**, No 1. – P. 171–182.

*Інститут експериментальної патології,  
онкології і радіобіології ім. Р. Є. Кавецького  
НАН України, Київ  
Національний інститут раку, Київ*

*Надійшло до редакції 12.12.2013*

**А. Г. Федорчук, А. Д. Лен, Ю. Р. Якшибаева, Г. В. Горбик,  
О. Н. Пясковская**

### **Чувствительность клеток карциномы легких Льюиса LLC и LLC/R9 к цитотоксическому действию естественных киллерных клеток и макрофагов мышей C57BL/6 *in vitro***

*Проведено сравнительное исследование чувствительности клеток исходного (LLC) и химиорезистентного (LLC/R9) вариантов карциномы легких Льюиса к несенсибилизированным макрофагам и естественным киллерным клеткам интактных мышей C57BL/6 *in vitro*. Показано, что формирование резистентности клеток карциномы легких Льюиса к цисплатину сопровождается повышением их чувствительности к цитотоксическому действию естественных киллерных клеток и снижением чувствительности к цитотоксическому действию макрофагов. Возможной причиной повышенной чувствительности этих клеток к цитотоксическому действию естественных киллеров может быть пониженный уровень экспрессии молекул I класса ГКГ. Сниженная чувствительность клеток химиорезистентного варианта к цитотоксическому действию несенсибилизированных макрофагов ассоциирована с повышенной способностью к аутофагии.*

O. G. Fedorchuk, A. D. Lyon, Yu. R. Yakshibaeva, G. V. Gorbik,  
O. N. Pyaskovskaya

**Sensitivity of Lewis Lung Carcinoma (LLC) and LLC/R9 cells to  
cytotoxic action exerted by murine natural killer cells and macrophages  
of C57BL/6 mice *in vitro***

*The comparative investigation of the sensitivity of primary LLC and drug resistant LLC/R9 cells to natural killer cells and macrophages of C57BL/6 intact mice is performed in vitro. It is shown that the forming of a resistance to cisplatin by LLC cells is accompanied by an increase of their sensitivity to the cytotoxic action of natural killer cells and a decrease of the susceptibility to the cytolytic activity of macrophages. High LLC/R9 cell sensitivity to the cytotoxic action of natural killer cells possibly was caused by a diminished expression of MHC class I molecules. Decreased sensitivity of resistant cells to the cytolysis by nonsensitized macrophages was associated with a high ability to undergo autophagy.*